Environment Canada Environnement Canada

Application of Direct Measurements of Optical Parameters to the Estimation of Lake Water Quality Indicators

R.P. Bukata, J.E. Bruton and J.H. Jerome

SCIENTIFIC SERIES NO. 140

INLAND WATERS DIRECTORATE
NATIONAL WATER RESEARCH INSTITUTE
CANADA CENTRE FOR INLAND WATERS
BURLINGTON, ONTARIO, 1985

(Disponible en français sur demande)

© Minister of Supply and Services Canada 1985

Cat. No. En 36-502/140E

ISBN 0-662-14184-9

Contents

	Page
ABSTRACT	viii
RÉSUMÉ	ix
EXECUTIVE SUMMARY	x
INTRODUCTORY THEORY	1
OPTICAL CROSS SECTIONS FOR LAKE ONTARIO	4
SUBSURFACE IRRADIANCE REFLECTANCE SPECTRA	5
SUBSURFACE IRRADIANCE REFLECTANCE AT A SINGLE WAVELENGTH	15
RELATIONSHIPS AMONG OPTICAL AND WATER QUALITY PARAMETERS	22
MULTIVARIATE OPTIMIZATION TECHNIQUE	23
APPLICATION OF A WATER QUALITY MODEL TO THE ESTIMATION OF CHLOROPHYLL, SUSPENDED MINERAL, AND DISSOLVED ORGANIC CARBON CONCENTRATIONS IN LAKE ONTARIO	25
DIFFICULTIES ASSOCIATED WITH CHLOROPHYLL PREDICTIONS	31
REFERENCES	32
APPENDIX. Glossary of terms	34

Table

1. Fifteen-point absorption and backscatter cross-section spectra used with equations 6 and 7 of this report 7

Illustrations

Page

Figure 1. Flow diagram outlining the operations employed in the development of subsurface optical water quality methodology 3

Figure 2. The calculated absorption cross sections for chlorophyll *a* uncorrected for phaeophytin contamination, total suspended minerals (SM), and dissolved organic carbon (DOC) 4

Figure 3. The calculated scattering cross sections for chlorophyll *a* uncorrected for phaeophytin contamination and total SM 4

Figure 4. Subsurface irradiance reflectance spectra for various chlorophyll *a* concentrations in a water mass for which the SM and DOC concentrations are kept fixed at zero 8

Figure 5. Subsurface irradiance reflectance spectra for various chlorophyll *a* concentrations in a water mass for which the DOC concentration is kept fixed at zero and the total SM concentration, at 0.10 g m^{-3} 8

Figure 6. Subsurface irradiance reflectance spectra for various chlorophyll *a* concentrations in a water mass for which the DOC concentration is kept fixed at zero and the total SM concentration, at 0.20 g m^{-3} 8

Figure 7. Subsurface irradiance reflectance spectra for various chlorophyll *a* concentrations in a water mass for which the DOC concentration is kept fixed at zero and the total SM concentration, at 0.50 g m^{-3} 9

Figure 8. Subsurface irradiance reflectance spectra for various chlorophyll *a* concentrations in a water mass for which the DOC concentration is kept fixed at zero and the total SM concentration, at 1.00 g m^{-3} 9

Figure 9. Subsurface irradiance reflectance spectra for various chlorophyll *a* concentrations in a water mass for which the DOC concentration is kept fixed at zero and the total SM concentration, at 2.0 g m^{-3} 9

Figure 10. Subsurface irradiance reflectance spectra for various chlorophyll *a* concentrations in a water mass for which the DOC concentration is kept fixed at zero and the total SM concentration, at 5.00 g m^{-3} 10

Figure 11. Subsurface irradiance reflectance spectra for various chlorophyll *a* concentrations in a water mass for which the DOC concentration is kept fixed at zero and the total SM concentration, at 10.0 g m^{-3} 10

Figure 12. Subsurface irradiance reflectance spectra for various chlorophyll *a* concentrations in a water mass for which the DOC concentration is kept fixed at zero and the total SM concentration, at 20.0 g m^{-3} 10

Figure 13. Subsurface irradiance reflectance spectra for various SM concentrations in a water mass containing a small fixed concentration of chlorophyll *a* and zero DOC 11

Illustrations (Cont.)

Page

Figure 14. Subsurface irradiance reflectance spectra for various SM concentrations in a water mass containing a large fixed concentration of chlorophyll *a* and zero DOC. 11

Figure 15. Subsurface irradiance reflectance spectra for various DOC concentrations in a water mass for which the SM concentration is kept fixed at 0.05 g m^{-3} and the chlorophyll *a* concentration, at 1.00 mg m^{-3} 12

Figure 16. Subsurface irradiance reflectance spectra for various DOC concentrations in a water mass containing a large fixed concentration of chlorophyll *a* (10.0 mg m^{-3}) and a small fixed SM concentration (0.05 g m^{-3}) 12

Figure 17. Subsurface irradiance reflectance spectra for various DOC concentrations in a water mass containing a small fixed chlorophyll *a* concentration (0.05 mg m^{-3}) and a large fixed SM concentration (10.0 g m^{-3}) 12

Figure 18. Subsurface irradiance reflectance spectra for various chlorophyll *a* concentrations in a water mass for which the DOC concentration is kept fixed at 2.0 g carbon m^{-3} and the total SM concentration, at zero 13

Figure 19. Subsurface irradiance reflectance spectra for various SM concentrations in a water mass for which the DOC concentration is kept fixed at 2.0 g carbon m^{-3} and the chlorophyll *a* concentration, at 0.05 mg m^{-3} 13

Figure 20. Subsurface irradiance reflectance spectra for various SM concentrations in a water mass for which the DOC concentration is kept fixed at 2.0 g carbon m^{-3} and the chlorophyll *a* concentration, at 10.0 mg m^{-3} 13

Figure 21. Subsurface irradiance reflectance spectra for various chlorophyll *a* and SM concentrations in a water mass for which the DOC concentration is kept fixed at 2.0 g carbon m^{-3} 14

Figure 22. Subsurface irradiance reflectance spectra for various chlorophyll *a* and SM concentrations in a water mass for which the DOC concentration is kept fixed at 10.0 g carbon m^{-3} 14

Figure 23. Relationship between subsurface irradiance reflectance at 450 nm (blue) and chlorophyll *a* concentration for a water mass in which the DOC concentration is kept fixed at 2.0 g carbon m^{-3} and the SM concentration is permitted to vary between zero and 20 g m^{-3} 17

Figure 24. Relationship between subsurface irradiance reflectance at 570 nm (green) and chlorophyll *a* concentration for a water mass in which the DOC concentration is kept fixed at 2.0 g carbon m^{-3} and the SM concentration is permitted to vary between zero and 20 g m^{-3} 17

Illustrations (Cont.)

Page

Figure 25. Relationship between subsurface irradiance reflectance at 650 nm (red) and chlorophyll *a* concentration for a water mass in which the DOC concentration is kept fixed at 2.0 g carbon m^{-3} and the SM concentration is permitted to vary between zero and 10 g m^{-3} 18

Figure 26. Relationship between subsurface irradiance reflectance at 450 nm (blue) and SM concentration for several discrete values of chlorophyll *a* concentration in a water mass for which the DOC concentration is kept fixed at 2.0 g carbon m^{-3} 18

Figure 27. Relationship between subsurface irradiance reflectance at 450 nm (blue) and SM concentration for a water mass in which the DOC concentration is permitted to vary between zero and 5 g carbon m^{-3} and the chlorophyll *a* concentration, to vary between 0.05 and 20.0 mg m^{-3} 19

Figure 28. Relationship between subsurface irradiance reflectance at 570 nm (green) and SM concentration for several discrete values of chlorophyll *a* concentration in a water mass for which the DOC concentration is kept fixed at 2.0 g carbon m^{-3} 19

Figure 29. Relationship between subsurface irradiance reflectance at 570 nm (green) and SM concentration for a water mass in which the DOC concentration is permitted to vary between zero and 5 g carbon m^{-3} and the chlorophyll *a* concentration, to vary between 0.05 and 20.0 mg m^{-3} 20

Figure 30. Relationship between subsurface irradiance reflectance at 650 nm (red) and SM concentration for several discrete values of chlorophyll *a* concentration in a water mass for which the DOC concentration is kept fixed at 2.0 g carbon m^{-3} 20

Figure 31. Relationship between subsurface irradiance reflectance at 650 nm (red) and SM concentration for a water mass in which the DOC concentration is permitted to vary between zero and 5 g carbon m^{-3} and the chlorophyll *a* concentration, to vary between 0.05 and 20.0 mg m^{-3} 21

Figure 32. Relationship between subsurface irradiance reflectance at 650 nm (red) and SM concentration for a water mass in which the DOC concentration is permitted to vary between zero and 5 g carbon m^{-3} and the chlorophyll *a* concentration, to vary between 0.05 and 5.0 mg m^{-3} 21

Figure 33. Comparison between predicted and directly measured SM concentrations 26

Figure 34. Comparison between predicted and directly measured DOC concentrations 26

Illustrations (Cont.)

Page

Figure 35. Comparisen between predicted and directly measured chlorophyll *a* concentrations 26

Figure 36. Comparison between the calculated "best fit" and directly measured subsurface irradiance reflectance spectra for a Niagara plume station in western Lake Ontario 27

Figure 37. Comparison between the directly measured subsurface irradiance reflectance spectrum of Figure 36 and two calculated subsurface irradiance reflectance spectra 27

Figure 38. Representative examples of directly measured subsurface irradiance reflectance spectra obtained at nearshore and midlake stations in Lake Ontario throughout the field season 27

Figure 39. The wavelength dependence of the diffuse fraction of the above-water downwelling irradiance throughout the field season 28

Figure 40. A comparison of the chlorophyll *a* absorption cross sections obtained from two optical/water quality data sets 29

Figure 41. Comparison between the calculated "best fit" and directly measured subsurface irradiance reflectance spectra for the Niagara plume station of Figure 36 29

Figure 42. Comparison between predicted and directly measured SM concentrations 30

Figure 43. Comparison between predicted and directly measured DOC concentrations 30

Figure 44. Comparison between predicted and directly measured chlorophyll *a* concentrations 30

Figure 45. Comparison between predicted and directly measured chlorophyll *a* concentrations on a monthly basis 30

Figure 46. An intercomparison of a number of independent attempts at determining the absorption cross sections of chlorophyll *a* 32

Abstract

This report contains an evaluation of direct measurements of optical parameters as a means of estimating water quality indicators (concentrations of chlorophyll *a*, suspended minerals, and dissolved organic carbon) that define natural lake waters. The analyses and discussions presented are based on the results of a coordinated optical/water quality study of a complex inland lake (Lake Ontario), and consequently represent a possible "worst case" approach to the problem, since a body of water such as Lake Ontario would understandably present a severe test of such optical modelling.

The report is not intended as a short course in lake optics, although the necessary mathematical theory is briefly presented, as is a glossary of the technical terminology used in the text. The key linkages between measured optical properties and water quality indicators are the specific absorption and scattering properties (cross sections) of the various aquatic components as a function of observed wavelengths. Considerable discussion is presented concerning not only the techniques used to estimate such optical cross sections but also the departures from constancy of such cross sections for Lake Ontario waters (and waters on a more global scale) and the restrictions that such departures from constancy impose upon water quality prediction.

In its most simple form the method of using optical parameters to estimate water quality considered in this report may be stated as follows: a direct measurement of the subsurface irradiance reflectance (volume reflectance) spectrum is obtained in the 400- to 700-nm (visible) range. Values of the wavelength dependencies of the optical cross sections of chlorophyll, suspended minerals, and dissolved organic carbon are then utilized in conjunction with appropriate optimization methodology to estimate the concentrations of chlorophyll, suspended minerals, and dissolved organic carbon that will generate a subsurface irradiance reflectance spectrum that most closely simulates the directly measured spectrum.

To illustrate the impact on the observed subsurface irradiance reflectance spectrum of varying the concentrations of the three principal organic and inorganic components, the report includes numerous examples of calculated optical spectra for water masses of distinctly dissimilar water quality.

The use of a volume reflectance measurement at a single wavelength as a means of estimating water quality indicators for multi-component waters is all but eliminated by this report. Employing the entire volume reflectance spectrum to estimate water quality indicators, however, appears to be considerably more promising. Despite the severe limitations on predictive capabilities resulting from the inconstancies of the optical cross sections, this work has realized acceptable success in estimating suspended mineral and dissolved organic carbon concentrations in Lake Ontario. This augures well for the use of such predictive methodology in optically less complex inland waters. Reliable predictive capabilities for chlorophyll concentrations continue to be much more elusive.

The model development and application presented here can by no means be regarded as definitive, representing as it does the current level of understanding and state of the art of such aquatic studies. Comparable work, however, is continuing at numerous optically oriented research institutions around the world.

Résumé

Le rapport porte sur l'évaluation des mesures directes de paramètres optiques comme moyens d'estimer les indicateurs (concentrations de chlorophylle *a*, de minéraux en suspension et de carbone organique dissous) de la qualité des eaux lacustres. Les analyses et les discussions présentées se fondent sur les résultats d'une étude par voie optique de la qualité des eaux d'un lac complexe (lac Ontario) et portent donc sur le pire cas possible, une masse d'eau telle que le lac Ontario présentant, on le comprendra, une épreuve très sévère d'une telle modélisation optique.

Le rapport n'est pas destiné à servir de cours abrégé sur l'optique lacustre, même si on présente rapidement la théorie mathématique nécessaire, ainsi qu'un vocabulaire des termes techniques utilisés. Les relations fondamentales entre les propriétés optiques mesurées et les indicateurs de qualité de l'eau sont les propriétés spécifiques d'absorption et de dispersion (selon les sections) des divers éléments du milieu aquatique en fonction des longueurs d'ondes observées. On discute longuement, non seulement des techniques utilisées pour estimer ces sections optiques, mais aussi les anomalies présentées par les eaux du lac Ontario (et les eaux sur une échelle plus générale) ainsi que les restrictions que ces anomalies imposent sur la prévision de la qualité de l'eau.

La méthode optique d'estimation de la qualité de l'eau peut être exposée le plus simplement possible comme suit : on obtient, dans la gamme du visible (400 à 700 nm) et par mesure directe, le spectre de la réflectance de l'irradiation sous la surface (réflectance volumique). Les relations données aux diverses longueurs d'ondes par les sections optiques des eaux chargées de chlorophylle, de minéraux en suspension et de carbone organique dissous servent ensuite, avec l'apport des méthodes appropriées d'optimisation, à estimer la concentration de ces paramètres qui produiront le spectre le plus fidèle au spectre observé.

Pour montrer l'effet de la variation des concentrations sur le spectre observé, le rapport donne de nombreux exemples des spectres optiques calculés pour des masses d'eau dont la qualité diffère de façon tranchée.

La mesure à une seule longueur d'onde est à toutes fins utiles rejetée comme moyen d'estimer les indicateurs de qualité d'une eau complexe. Le recours au spectre entier semble toutefois beaucoup plus prometteur. Les anomalies des sections optiques limitent beaucoup les possibilités de la prédiction, mais notre travail a permis d'estimer de façon acceptable les concentrations de minéraux en suspension et de carbone organique dissous dans le lac Ontario. Ce résultat s'avère de bon augure pour l'application d'une telle méthode de prédiction à des eaux continentales optiquement moins complexes. Quant aux possibilités de prédiction fiable des concentrations de la chlorophylle, elles continuent de nous échapper.

La construction et l'utilisation du modèle présenté ne peuvent en aucun cas être considérées comme définitives, étant le portrait fidèle du niveau actuel des connaissances et des techniques de la discipline. Toutefois, des travaux semblables se poursuivent dans de nombreuses autres institutions de recherche qui, dans le monde, s'intéressent aux paramètres optiques.

Executive Summary

The colour of water has often been considered as an indicator of water quality. This hypothesis is often quantified with a Secchi disk estimate of water transparency and forms the basis for remote airborne or satellite measurements proposed to represent a measure of water quality.

This report examines the basic properties of scattering and absorption of water in terms of three indicators often used as a measure of water quality—concentrations of chlorophyll *a*, suspended minerals, and dissolved organic carbon—and relates these properties to measurable subsurface irradiance reflectance (volume reflectance). The wavelength dependency of each of the water quality indicators is examined, and the interactive influence on the total volume reflectance calculated.

The theoretical considerations indicate that no single wavelength or simple multiple of wavelengths can be used with significant sensitivity to relate the water quality indicators to volume reflectance. If a comprehensive analysis of the entire visible spectrum is considered, the suspended minerals and dissolved organic carbon concentrations may be specified to within a factor of two. In inland lake waters, the specification of chlorophyll *a* concentrations may be extremely hazardous, and in the presence of significant concentrations of suspended minerals and/or dissolved organic carbon, chlorophyll *a* cannot be accurately quantified.

Empirical comparisons of measurements of chlorophyll *a*, suspended minerals, and dissolved organic carbon coincident with measurements of volume reflectance in Lake Ontario were used to validate the theoretical model. In general, reasonable agreements were obtained, with the exception of chlorophyll *a*, where the measured concentrations were generally less than those calculated from the model. Empirical adjustments were able to improve the agreement but indicate that relationships may be inconstant. This problem may relate, at least in part, to the standard methods of measuring chlorophyll *a* and to the relationship of chlorophyll *a* to phytoplankton biomass.

The report provides a thorough examination of the basis and potential of optical measurements to the general area of water quality using the primary property of volume reflectance. This must relate to any airborne or satellite observations.

Application of Direct Measurements of Optical Parameters to the Estimation of Lake Water Quality Indicators

R.P. Bukata, J.E. Bruton and J.H. Jerome

INTRODUCTORY THEORY

The combined processes of scattering and absorption control the manner in which impinging radiation propagates through a natural water mass. The nature and magnitude of the scattering and absorption processes depend, in turn, upon the nature and concentrations of the suspended and dissolved organic and inorganic materials distributed within the water column, as well as on the nature and radiance distribution of the impinging radiation. Since water masses display both spatial and temporal variations in their organic and inorganic compositions, it logically follows that they will be characterized by related variabilities in their observed interactions with the impinging radiation field. Consequently, studies of the optical properties of water masses must contend with two broad categories of optical properties. The *inherent* optical properties of a water mass are those that are totally independent of the spatial distribution of the impinging radiation, while the so-called *apparent* optical properties of a water mass are those that are dependent upon the spatial distribution of impinging radiation.

The apparent optical properties of a water mass include the following:

(a) Irradiance reflectance (volume reflectance), R

(b) Irradiance attenuation coefficient, K.

The inherent optical properties of a water mass include the following:

(a) Total attenuation coefficient, c

(b) Absorption coefficient, a

(c) Scattering albedo, ω_0

(d) Scattering coefficient, b

(e) Forwardscattering probability, F

(f) Backscattering probability, B

(g) Volume scattering function, $\beta(\Theta)$.

The Appendix contains a glossary of technical definitions of the terms used in this report.

Since the electromagnetic frequency spectrum comprises many orders of magnitude, and since water quality is a highly subjective term encompassing myriad species and subspecies of organic and inorganic materials, a comprehensive document relating optical behaviour to water quality is beyond the scope of current capabilities. Consequently, this work will consider as its terms of reference an electromagnetic spectrum restricted to the visible wavelengths (400 to 700 nm) and the quality of a water mass to be defined in terms of its chlorophyll *a*, suspended mineral, and dissolved organic carbon concentrations.

The inherent optical properties b and B are mathematically defined in terms of appropriate integrations of the volume scattering function, $\beta(\Theta)$. Consequently, direct measurements of the inherent optical properties of natural waters require sophisticated instrumentation capable of determining the entire volume scattering function, $\beta(\Theta)$, to separate the scattering coefficient, b, and the absorption coefficient, a, from the total attenuation coefficient, c ($c = a + b$). It is considerably easier, however, to perform *in situ* measurements of the apparent optical properties of the water column. The total attenuation coefficient, c, is readily obtained from transmissometry, and the apparent optical properties, R and K, are readily determined from upwelling and downwelling spectrometric measurements. Consequently, a widely used approach to the general area of ocean and lake optics has been to determine the general relationships between the inherent and apparent optical properties through the development of models based on suitable simulations of the radiative transfer equations. Two such models have been proposed: one by Gordon *et al.* (1975), using a Monte Carlo simulation, and the other by Di Toro (1978), using a combination of an exponential and a quasi-single scattering approximation. Although both radiative transfer simulations have been employed at the National Water Research Institute, the rest of this report will consider only the Gordon *et al.* (1975) simulation.

From Gordon *et al*. (1975), curve fitting to the Monte Carlo calculations results in the equation:

$$\omega_o F = \sum_{n=0}^{N} k_n'(\tau) \left[\frac{K(\tau)}{c(\tau) D_d(\tau)}\right]^n \quad (1)$$

and

$$\frac{\omega_o B}{1-\omega_o F} = \sum_{n=0}^{N} r_n'(\tau) [R(\tau)]^n \quad (2)$$

where $\omega_o = \frac{b}{c} \equiv$ scattering albedo

$F \equiv$ forwardscattering probability

$B \equiv$ backscattering probability = 1-F

$K(\tau) \equiv$ irradiance attenuation coefficient at depth τ for downwelling irradiance

$R(\tau) \equiv$ irradiance reflectance (volume reflectance) at depth τ for downwelling irradiance

$D_d(\tau) \equiv$ distribution function at depth τ for downwelling irradiance

$c(\tau) \equiv$ total attenuation coefficient at depth τ

$k_n'(\tau)$ and $r_n'(\tau)$ are the sets of appropriate coefficients for the expansions of Equations 1 and 2.

Gordon *et al*. (1975) have determined two sets of values for the coefficients $r_n'(\tau)$, one set appropriate for conditions of solar incidence angles $\leq 20°$, and the other set appropriate for solar incidence angles $\geq 30°$ as measured in the water column. The set of coefficients $k_n'(\tau)$ is independent of sun angle.

Equations 1 and 2 then enable the apparent optical properties $K(\tau)$, $R(\tau)$ and the inherent optical property $c(\tau)$ (determined from *in situ* lake measurements) to be used in the determination of the inherent optical properties, ω_o, a, b, F and B. The implicit wavelength dependence of Equations 1 and 2 has been omitted for simplicity.

The inherent optical properties are themselves interrelated (c = a + b) and display additive properties which are dependent upon the presence of scattering and absorption centres within the water column:

$$a(\lambda) = \sum_{i=1}^{n} x_i a_i(\lambda)$$

$$b(\lambda) = \sum_{i=1}^{n} x_i b_i(\lambda) \quad (3)$$

$$(Bb)(\lambda) = \sum_{i=1}^{n} x_i (Bb)_i(\lambda)$$

where $(Bb)(\lambda) \equiv$ backscatter coefficient at wavelength λ, the product of B and b

$x_i \equiv$ concentration of the ith component of the water mass in question

$a_i(\lambda) \equiv$ absorption at wavelength λ for a unit concentration of component i

$b_i(\lambda) \equiv$ scattering at wavelength λ for a unit concentration of component i

$(Bb)_i(\lambda) \equiv$ backscattering at wavelength λ for a unit concentration of component i.

Since $a_i(\lambda)$, $b_i(\lambda)$ and $(Bb)_i(\lambda)$ represent the optical behaviour (in terms of absorption and scattering) of the water column per unit concentration of component matter, they will be referred to as the optical cross sections of the water mass in subsequent discussions. The determination of these optical cross sections clearly provides the linkages between the inherent optical properties of a water mass and its water quality parameters. Obviously, the definitive optical model should consider the cross sections of every species and subspecies of aquatic components present in natural water masses, as well as possible temporal, shape and size dependencies of each. Such a model is clearly unattainable. The present work considers that at any instant of time a natural water mass may be taken to be defined by a homogeneous combination of pure water, unique suspended organic material (considered to be represented by the chlorophyll *a* concentration corrected for phaeophytin contamination), unique suspended inorganic material (considered to be represented by the suspended mineral concentration, SM), dissolved organic material (represented by dissolved organic carbon, DOC) and a non-living organic component NLO, determined in the following manner:

$$\frac{NLO}{78} = \frac{SO}{78} - \frac{Chl_{cor}}{Chl_{unc}} \cdot \frac{POC}{24} \quad (4)$$

where SO = measured value of total suspended organic material concentration

Chl_{unc} = measured value of chlorophyll *a* uncorrected for phaeophytin contamination

Chl_{cor} = measured value of chlorophyll *a* corrected for phaeophytin contamination

POC = measured value of particulate organic carbon concentration.

The units in Equation 4 have been normalized on the assumption (Burns, 1980) that the average organic component may be represented by the molecular formula $C_2H_6O_3$ (and therefore by a molecular weight of 78 a.u.). Equation 4, however, does not take into account the contribution from the living zooplankton population.

For such a five-component optical model (SM, Chl *a*, DOC, NLO, plus pure water), Equation set 3 may be written

$$a(\lambda) = a_w(\lambda) + x a_{Chl}(\lambda) + y a_{SM}(\lambda) + z a_{DOC}(\lambda) + u\, a_{NLO}(\lambda)$$

$$b(\lambda) = b_w(\lambda) + x\, b_{Chl}(\lambda) + y\, b_{SM}(\lambda) + u\, b_{NLO}(\lambda) \quad (5)$$

$$(Bb)(\lambda) = (Bb)_w(\lambda) + x(Bb)_{Chl}(\lambda) + y(Bb)_{SM}(\lambda) + u(Bb)_{NLO}(\lambda)$$

where the subscripts w, Chl, SM, DOC and NLO refer to the pure water, unique organic, unique inorganic, dissolved organic and unique non-living organic components of the water column, respectively; x, y, z and u are the concentrations of chlorophyll *a* (corrected for phaeophytin contamination), suspended minerals, dissolved organic carbon, and non-living organic material, respectively; and the components of a (a_{Chl}, a_{SM}, a_{DOC}, a_{NLO}), b(b_{Chl}, b_{SM}, b_{NLO}) and Bb[$(Bb)_{Chl}$, $(Bb)_{SM}$, $(Bb)_{NLO}$] are the optical cross sections.

To obtain values for the cross sections, a coordinated spectro-optical program was conducted in western Lake Ontario. The entire program was a joint venture between NWRI (National Water Research Institute), CCRS (Canada Centre for Remote Sensing) and Moniteq Ltd., which included an airborne remote sensing and atmospheric study component in addition to the *in situ*/theoretical optical program discussed in this report. Logistical details of the multi-stage Lake Ontario experiment are presented elsewhere (Jain *et al.*,1980; Zwick *et al.*, 1980; Bukata *et al.*, 1981a,b). Suffice to say that coordinated collections of water samples (which were laboratory-analyzed for water quality parameters) occurred in conjunction with *in situ* determinations of transmission profiles (using a modified Martek multiband XMS transmissometer) and spectral irradiance profiles and spectral volume reflectance (using a Techtum QSM 2500 scanning Quanta spectrometer) in the upper 10 m of water. Details of the numerical determinations of the optical cross sections are given in Bukata *et al.* (1981a). The flow diagram of Figure 1 outlines the basic steps taken. The *in situ* transmissometer and spectrometer data were used to determine the inherent optical property, $c(\lambda,\tau)$, and the apparent optical properties, $K(\lambda,\tau)$ and $R(\lambda,\tau)$. The Gordon *et al.* (1975) model (Equations 1 and

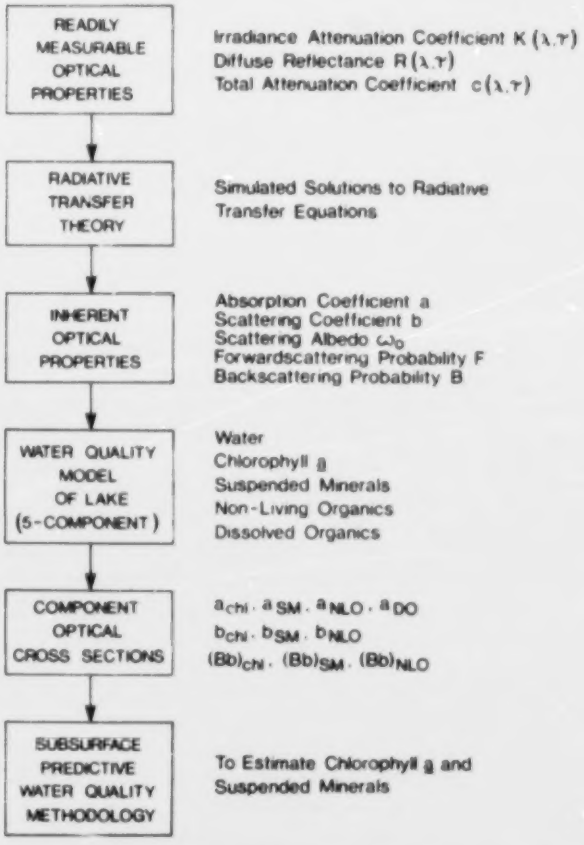

Figure 1. Flow diagram outlining the operations employed in the development of subsurface optical water quality methodology.

2) was utilized (see Bukata *et al.*, 1979) to determine the inherent optical properties a, b, ω_o, F and B. Multiple regression techniques applied to the determined values of a, b and (Bb) and the measured values of water quality parameters (Equation set 5) yielded the desired optical cross sections for the five-component model.

It was discovered, however, at least for Lake Ontario, that only a slight loss in generality occurred when a four-component optical model that disregarded the contribution of NLO was considered. This was partly because the NLO component was rarely a dominant factor in the optical behaviour of Lake Ontario (the numerical value of NLO concentration [in grams per cubic metre] rarely exceeded 10% of the numerical value of chlorophyll *a* concentration [in milligrams per cubic metre]). However, the use of a four-component model necessitated the use of Chl a_{unc} (i.e., chlorophyll *a* concentration uncorrected for phaeophytin contamination). Consequently, the rest of this report will deal with a four-component optical model (pure water, chlorophyll *a* with phaeophytin, suspended minerals, and dissolved organic carbon). In such a model, Equation set 5 becomes:

$$a(\lambda) = a_w(\lambda) + xa_{Chl}(\lambda) + ya_{SM}(\lambda) + za_{DOC}(\lambda)$$

$$b(\lambda) = b_w(\lambda) + xb_{Chl}(\lambda) + yb_{SM}(\lambda) \qquad (6)$$

$$(Bb)(\lambda) = (Bb)_w(\lambda) + x(Bb)_{Chl}(\lambda) + y(Bb)_{SM}(\lambda)$$

where it is noted that the subscript Chl now refers to Chl a_{unc} and x refers to the concentration of Chl a_{unc}.

OPTICAL CROSS SECTIONS FOR LAKE ONTARIO

The cross sections for the four-component optical model (pure water, SM, Chl a_{unc}, DOC) are illustrated in Figures 2 and 3 as a function of visible wavelength. Figure 2 illustrates the $a_i(\lambda)$ values and Figure 3 illustrates the $b_i(\lambda)$ values for Lake Ontario waters. The values of $a_w(\lambda)$ and $b_w(\lambda)$ were taken from the work of Hulburt (1945). Once these optical cross sections are known, a volume reflectance spectrum $R_v(\lambda)$ may be generated for water masses made up of varying amounts of chlorophyll *a* (uncorrected for phaeophytin contamination), suspended minerals, and dissolved organic carbon, utilizing the Gordon *et al.* (1975) Monte Carlo simulation model. Therefore in principle, *in situ* measured volume reflectance spectra could be compared with a catalog of existing volume reflectance spectra for water masses made up of known component concentrations. Such comparison, however, is subject to the following stipulations:

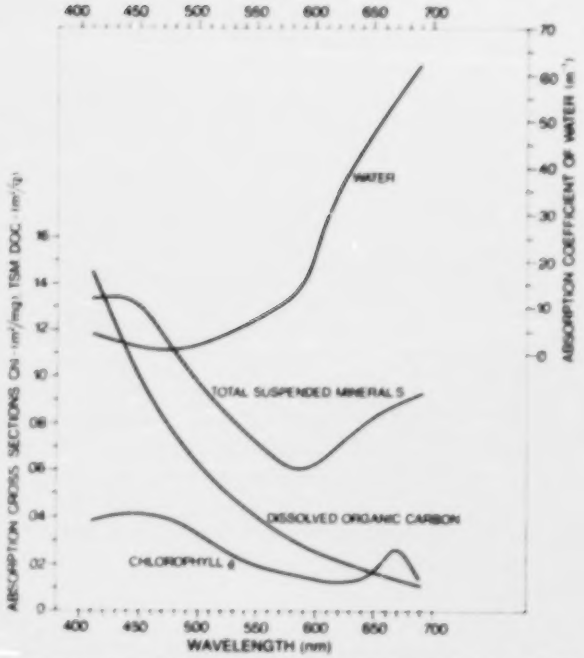

Figure 2. The calculated absorption cross sections for chlorophyll *a* uncorrected for phaeophytin contamination (Chl a_{unc}), total suspended minerals (SM), and dissolved organic carbon (DOC). Also shown are the absorption coefficients for pure water.

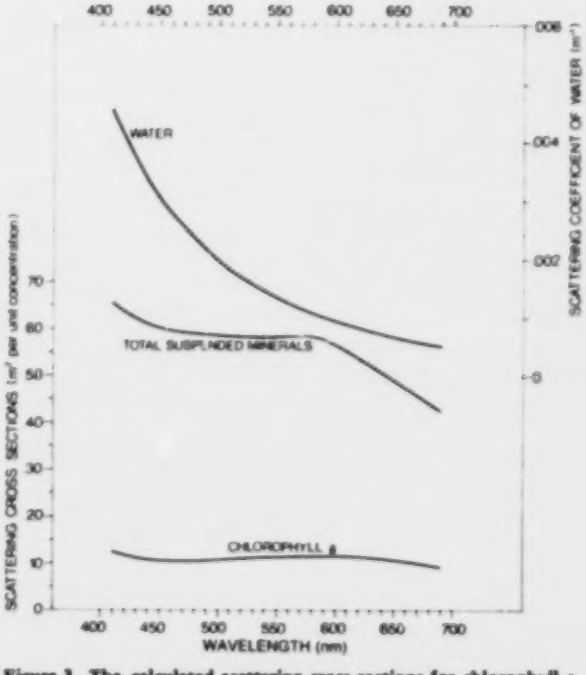

Figure 3. The calculated scattering cross sections for chlorophyll *a* uncorrected for phaeophytin contamination (Chl a_{unc}) and total SM. Also shown are the scattering coefficients for pure water.

(a) The natural waters under consideration must be appropriately defined by a four-component optical model. Clearly, the more optically complex a water mass becomes (i.e., the greater the number of components which significantly alter its optical behaviour), the less reliable will be the use of the current model in providing lake water quality indicators.

(b) The optical cross sections must be known. Furthermore, they must be confidently assumed to be relatively invariant, or at least insignificantly varying during the measurement time interval. Such conditions are satisfied at some locations and time periods but not at others. For example, the optical cross sections determined in western Lake Ontario have been shown to possess, to a large degree, a lake-wide applicability (Bukata *et al.*, 1981c) throughout most of the field season. However, as yet unpublished work appears to indicate that Lake Ontario waters may require an independent set of optical cross sections during the autumn months (due possibly to a change in the indigenous chlorophyll-bearing biota).

(c) The water mass is considered to be homogeneous. The current model does not include possible layering effects.

(d) No provision is incorporated for chemical impurities. Small concentrations of such chemicals (by comparison with the concentrations of Chl, SM and DOC) produce negligible absorption and scattering effects and their detection is beyond current *in situ* optical techniques.

SUBSURFACE IRRADIANCE REFLECTANCE SPECTRA

From Gordon *et al.* (1975), the irradiance reflectance (also referred to as the volume reflectance), $R(0\lambda)$, just beneath the free-surface layer is given by

$$R(0\lambda) = \sum_{n=0}^{N} r_n(0) \left[\frac{Bb(\lambda)}{a(\lambda) + Bb(\lambda)}\right]^n \qquad (7)$$

where all terms are as previously defined. The term $r_n(0)$ signifies the expansion coefficients, considered in this work as those appropriate for solar incidence angles $\leq 20°$, as measured within the water column. Furthermore, N is taken as 3. Using the additive properties of $a(\lambda)$ and $Bb(\lambda)$ displayed in Equation set 6 for the four-component water mass representation, and using the optical cross sections illustrated in Figures 2 and 3, it is clear that point-by-point subsurface irradiance reflectance spectra may be generated for selected values of x, y and z, i.e., for a variety of water masses displaying varying concentrations of chlorophyll *a* (uncorrected for phaeophytin contamination), suspended minerals, and dissolved organic carbon.

Figure 4 illustrates a family of subsurface irradiance reflectance spectra (at 20-nm increments from 410 to 690 nm) calculated in this manner for varying chlorophyll *a* concentrations in a water mass for which the suspended mineral and dissolved organic carbon concentrations are kept fixed at zero (i.e., for a two-component model of the water mass, namely chlorophyll and pure water). Clearly, water masses with small concentrations of chlorophyll *a* display a pronounced volume reflectance in the blue region of the spectrum and minimal volume reflectance in the red. Increasing the chlorophyll concentration in such a water mass (i.e., a water mass composed solely of pure water and chlorophyll) tends to decrease the volume reflectance at the blue wavelengths while increasing the volume reflectance at the red wavelengths at a more rapid rate. For chlorophyll concentrations of more than ~1 to 2 mg m^{-3}, the irradiance reflectance spectra are characterized by well-defined blue minima and green maxima. Of particular note is the pivotal role played by the 505-nm wavelength, indicating that in such waters (i.e., pure water and chlorophyll) the volume reflectance at 505-nm is independent of the chlorophyll concentration, i.e. $\frac{\partial R(0.505)}{\partial Chl} = 0$. By integrating Equation 7 with respect to chlorophyll, it may be shown that the volume reflectance will be independent of chlorophyll at that value of λ for which $\frac{Bb_{Chl}}{a_{Chl}} = \frac{Bb_w}{a_w}$, i.e., at that value of λ for which the backscatter to absorption ratio of chlorophyll is equal to the backscatter to absorption ratio of pure water. Therefore, an equilibrium is established between the optical properties of each of the two aquatic components.

The effect of the insertion of a small fixed concentration of suspended minerals (0.10 g m^{-3}) into the water mass (i.e., a three-component representation) is shown in the family of subsurface irradiance reflectance spectra illustrated in Figure 5. In such a water mass (0.10 g m^{-3} SM, zero DOC), the rate at which the volume reflectance in the blue region is depressed by the addition of chlorophyll is more nearly equal to the rate of elevation of the volume reflectance in the red. The pivotal wavelength at which $\frac{\partial R(0,\lambda)}{\partial Chl} = 0$ has shifted to ~570 nm. For such a three-component water mass representation (pure water, chlorophyll and suspended minerals), the volume reflectance will be independent of chlorophyll concentration at that wavelength for which $\frac{Bb_{Chl}}{a_{Chl}} = \frac{Bb_w + Bb_{SM}C_{SM}}{a_w + a_{SM}C_{SM}}$.

An equilibrium is thus established between the optical properties of chlorophyll and the combined optical properties of the remaining two aquatic components.

In a similar manner, Figures 6 to 12 represent the family of subsurface irradiance reflectance spectra for varying chlorophyll concentrations, a fixed concentration of zero DOC, and fixed suspended mineral concentrations of 0.2, 0.5, 1.0, 2.0, 5.0, 10.0 and 20.0 g m^{-3}, respectively. Note that the pivotal wavelength at which $\frac{\partial R(0,\lambda)}{\partial Chl} = 0$ rapidly moves beyond 690 nm as the suspended mineral concentration increases.

Even though the dramatic impact upon the subsurface irradiance reflectance spectrum of adding suspended mineral concentrations to a lake containing chlorophyll may be readily appreciated from a consideration of Figures 4 to 12, Figure 13 illustrates the evaluation of subsurface irradiance reflectance spectra resulting from a systematic increase of suspended mineral concentration in a lake containing zero DOC and a small fixed amount of chlorophyll. Similarly, Figure 14 illustrates the effect of varying suspended mineral concentrations in a lake containing zero DOC and a large fixed amount of chlorophyll. As logically expected, large concentrations of suspended minerals (say of more than ~ 0.5 g m^{-3}) drastically curtail the spectral sensitivity of the volume reflectance to changes in chlorophyll concentrations.

Clearly, therefore, a wide range of subsurface irradiance reflectance spectra may be anticipated for a three-component (pure water, chlorophyll, suspended minerals) representation of a water mass. The addition of a fourth component (DOC) to the lake system will also significantly alter the irradiance reflectance spectrum observed just beneath the air/water interface, particularly at the lower visible wavelengths (Fig. 2). This impact is readily seen in Figure 15 for the family of volume reflectance spectra (for varying DOC concentrations) for a water mass with a small fixed suspended mineral concentration of 0.05 g m^{-3} and a fixed chlorophyll *a* concentration of 1.00 mg m^{-3}. It is evident that for relatively clear waters (i.e., waters characterized by small concentrations of suspended minerals and small to moderate concentrations of chlorophyll), the systematic addition of DOC results in a rapid depression of the subsurface irradiance reflectance at wavelengths of less than ~ 600 nm (i.e., the blue and green region of the visible spectrum), and a comparatively minimal depression of the subsurface irradiance reflectance at wavelengths of more than ~ 600 nm (i.e., in the red region of the visible spectrum).

Figure 16 illustrates the impact of DOC on a water mass characterized by a large fixed concentration of Chl *a* (10.0 mg m^{-3}) and a small fixed concentration of suspended minerals (0.05 g m^{-3}), whereas Figure 17 illustrates the impact of DOC on a water mass characterized by a small fixed concentration of Chl *a* (0.05 mg m^{-3}) and a large fixed concentration of suspended minerals (10.0 g m^{-3}). For the water masses depicted in Figures 16 and 17, it is clear that

(a) The water mass containing high concentrations of suspended minerals displays volume reflectance spectra which are an order of magnitude higher than the water mass containing high concentrations of chlorophyll.

(b) The effect of DOC is more noticeable in water masses containing high chlorophyll and low suspended mineral concentrations than in water masses containing low chlorophyll and high suspended mineral concentrations.

(c) For all water masses, the maximum impact of DOC will be registered in the low-wavelength (blue) portion of the visible spectrum, while the minimum impact of DOC will be registered in the high-wavelength (red) portion of the visible spectrum.

Although local values of DOC may vary, both spatially and temporally throughout inland aquatic systems, it has been observed (Bukata *et al.*, 1981a) that a not unreasonable typical value for the dissolved organic carbon concentration for the lower Great Lakes is ~ 2.0 g carbon m^{-3}. Figures 18 and 19 illustrate the anticipated changes in subsurface irradiance reflectance spectra resulting from changes in chlorophyll and suspended mineral concentrations, respectively, in a lake characterized by a fixed DOC concentration of 2.0 g carbon m^{-3}. Figure 18 illustrates the family of volume reflectance spectra produced by varying the chlorophyll concentrations in a water mass containing no suspended mineral concentration, whereas Figure 19 illustrates the family of volume reflectance spectra resulting from varying the suspended mineral concentrations in a water mass containing virtually no chlorophyll (a small fixed concentration of 0.05 mg m^{-3}).

Certain similarities between Figures 18 and 19 are immediately apparent. Increasing either the suspended mineral or chlorophyll concentration in a water mass containing 2.0 g carbon m^{-3} DOC results in more rapid volume reflectance increases in the red end of the spectrum than in the blue, with the basic shape of the spectrum of chlorophyll in the absence of suspended minerals becoming very similar to the basic shape of the spectrum of suspended

minerals in the absence of chlorophyll. Clearly, large concentrations of suspended minerals result in volume reflectance values an order of magnitude greater than those resulting from large concentrations of chlorophyll. Similarly, small concentrations of suspended minerals result in volume reflectance values an order of magnitude greater than those resulting from small concentrations of chlorophyll. However, as seen from Figures 18 and 19, for natural water masses containing 2.0 g carbon m^{-3} DOC, comparable volume reflectance values are observed for water masses containing large concentrations of chlorophyll (and no suspended minerals) and for water masses containing relatively small concentrations of suspended minerals (and no chlorophyll).

The effects on observed subsurface irradiance reflectance spectra of increasing the suspended mineral concentration in a lake containing a fixed DOC concentration of 2.0 g carbon m^{-3} and a large fixed chlorophyll *a* concentration of 10.0 mg m^{-3} are illustrated in Figure 20.

Figure 21 depicts the interactive effects on the volume reflectance spectra of varying both the chlorophyll and the suspended mineral concentrations in a lake containing 2.0 g carbon m^{-3} DOC. Figure 22 illustrates a comparable situation in a lake containing 10.0 g carbon m^{-3} DOC.

Clearly, the examples of subsurface irradiance reflectance spectra presented in this section serve to illustrate the impact that variations in the water quality parameters (chlorophyll, suspended minerals, dissolved organic carbon) will have on the *in situ* measurements of such optical spectra and consequently underline the care that must be taken in deconvolving optical complexities when measured volume reflectance spectra are used to estimate the water quality parameters.

It is equally clear that the examples of subsurface irradiance reflectance spectra presented in this report are inexhaustive, and by no means cover the myriad spectra possible for lakes as complex as Lake Ontario. Consequently, Table 1 contains a numerical listing of the 15-point (20-nm increments from 410 to 690 nm) absorption and backscatter cross-section spectra utilized in this report. The interested reader may use the data in Table 1 together with Equations 6 and 7 to generate the anticipated subsurface irradiance reflectance (volume reflectance) for any desired water mass.

Table 1. Fifteen-Point Absorption and Backscatter Cross-section Spectra Used with Equations 6 and 7 of This Report

Wavelength (nm)	a_w	a^1_{Chl}	a^2_{Chl}	a_{SM}	a_{DOC}	$(Bb)_w$	$(Bb)_{Chl}$	$(Bb)_{SM}$
410	0.038 00	0.037 60	0.024 28	0.133 50	0.145 00	0.002 29	0.001 36	0.052 40
430	0.026 00	0.040 50	0.021 88	0.135 10	0.121 00	0.001 86	0.001 25	0.049 92
450	0.017 00	0.041 00	0.019 38	0.130 90	0.100 00	0.001 52	0.001 19	0.048 16
470	0.017 00	0.040 20	0.018 17	0.116 80	0.082 90	0.001 28	0.001 16	0.047 60
490	0.021 00	0.035 50	0.015 86	0.103 40	0.068 80	0.001 08	0.001 17	0.047 36
510	0.026 00	0.030 40	0.013 41	0.092 20	0.057 00	0.000 91	0.001 20	0.047 12
530	0.030 00	0.023 60	0.008 55	0.083 40	0.048 00	0.000 77	0.001 25	0.046 80
550	0.037 00	0.019 00	0.005 84	0.073 70	0.040 10	0.000 66	0.001 28	0.046 88
570	0.057 00	0.017 30	0.005 50	0.063 80	0.033 30	0.000 58	0.001 27	0.046 96
590	0.112 00	0.015 00	0.002 96	0.061 10	0.027 90	0.000 50	0.001 24	0.046 16
610	0.236 00	0.012 50	0.005 18	0.067 40	0.023 40	0.000 44	0.001 25	0.044 08
630	0.274 00	0.012 00	0.018 14	0.076 60	0.019 50	0.000 38	0.001 22	0.041 60
650	0.303 00	0.016 00	0.022 31	0.083 50	0.016 20	0.000 33	0.001 16	0.039 20
670	0.370 00	0.026 00	0.027 21	0.087 30	0.015 20	0.000 30	0.001 09	0.036 80
690	0.463 00	0.013 00	0.017 16	0.092 70	0.010 50	0.000 26	0.000 99	0.034 08

a^1_{Chl} = The chlorophyll absorption cross section represented by curve B in Figure 46.
a^2_{Chl} = The chlorophyll absorption cross section represented by curve C in Figure 46.

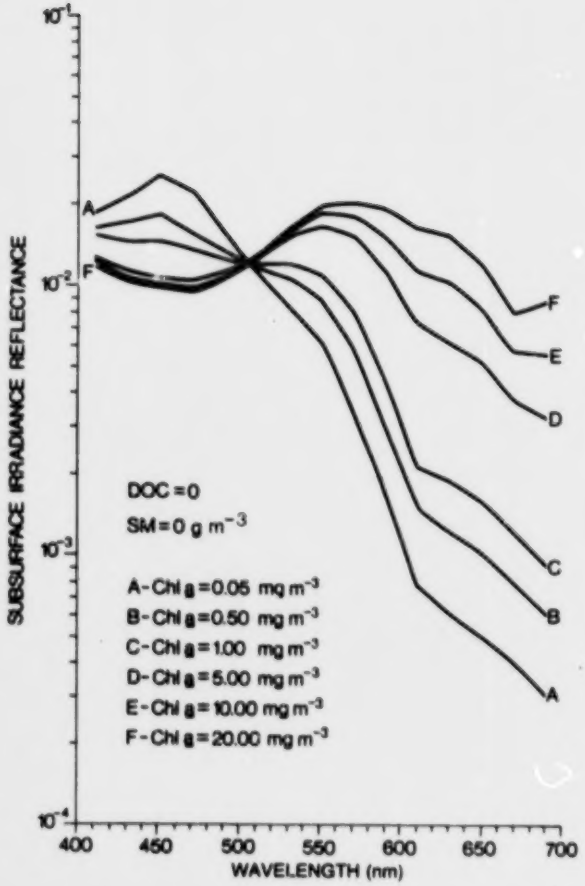

Figure 4. Subsurface irradiance reflectance spectra for various chlorophyll *a* concentrations in a water mass for which the SM and DOC concentrations are kept fixed at zero.

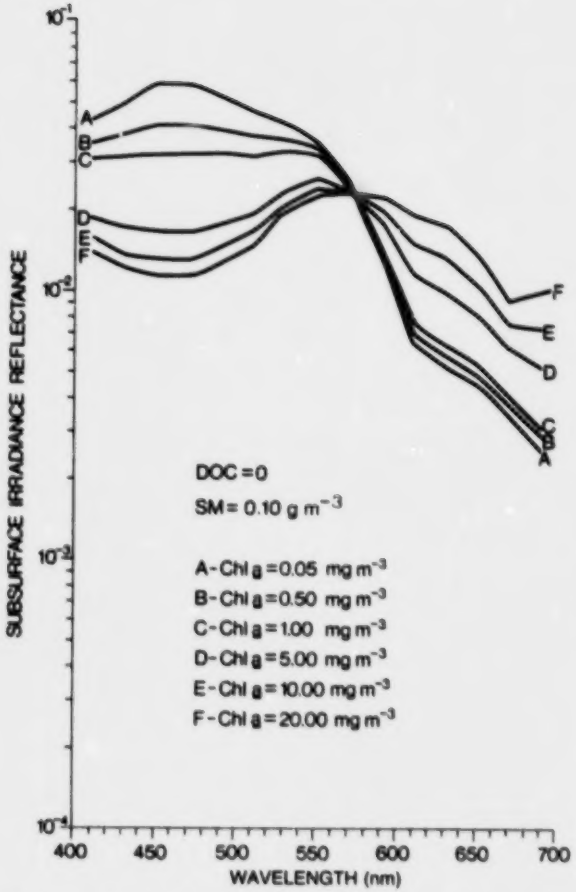

Figure 5. Subsurface irradiance reflectance spectra for various chlorophyll *a* concentrations in a water mass for which the DOC concentration is kept fixed at zero and the total SM concentration, at 0.10 g m^{-3}.

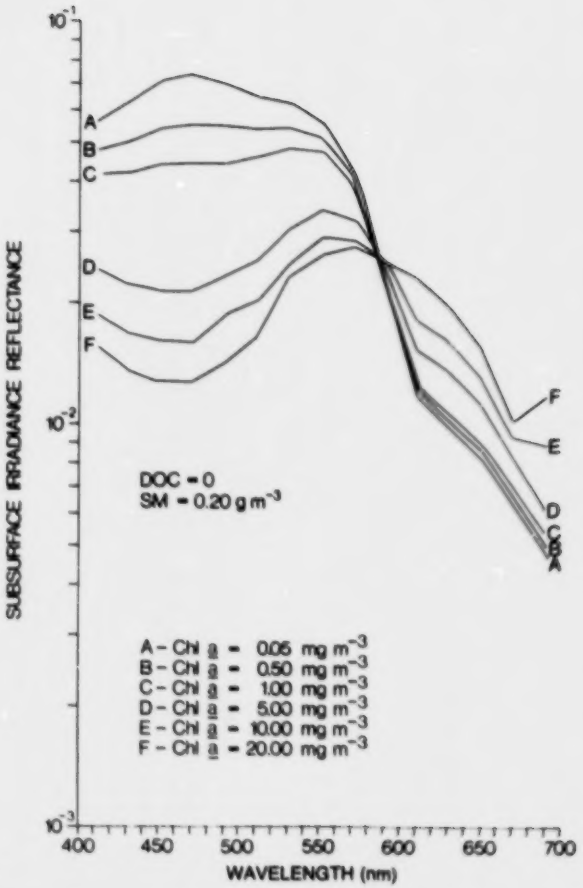

Figure 6. Subsurface irradiance reflectance spectra for various chlorophyll *a* concentrations in a water mass for which the DOC concentration is kept fixed at zero and the total SM concentration, at 0.20 g m^{-3}

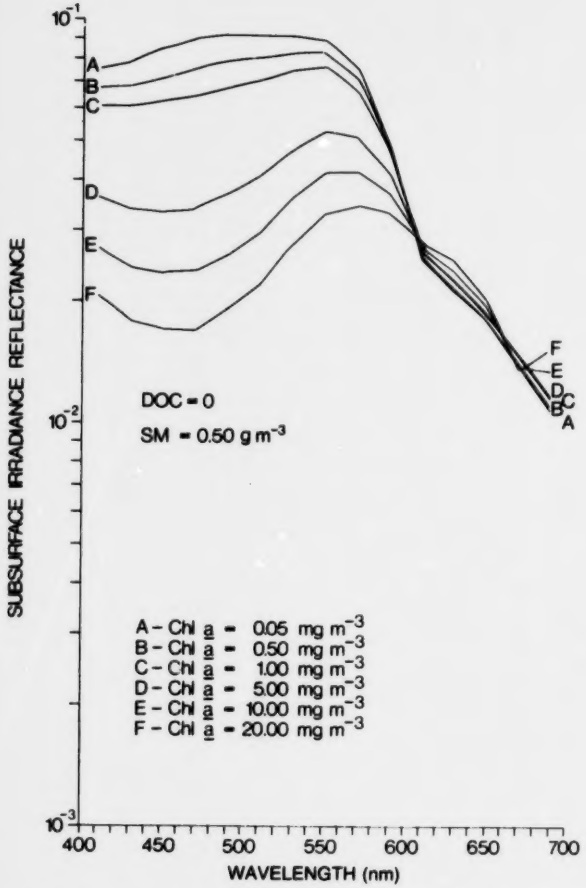

Figure 7. Subsurface irradiance reflectance spectra for various chlorophyll *a* concentrations in a water mass for which the DOC concentration is kept fixed at zero and the total SM concentration, at 0.50 g m^{-3}.

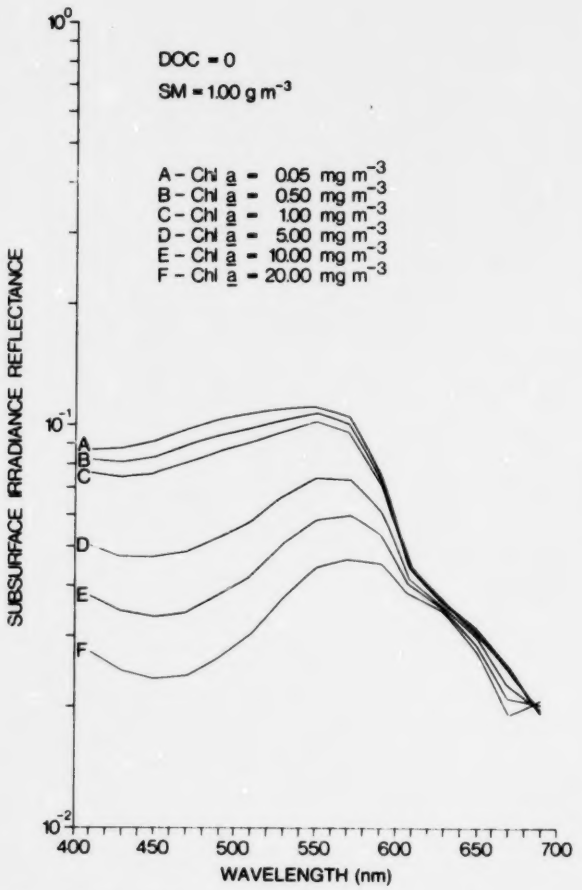

Figure 8. Subsurface irradiance reflectance spectra for various chlorophyll *a* concentrations in a water mass for which the DOC concentration is kept fixed at zero and the total SM concentration, at 1.00 g m^{-3}.

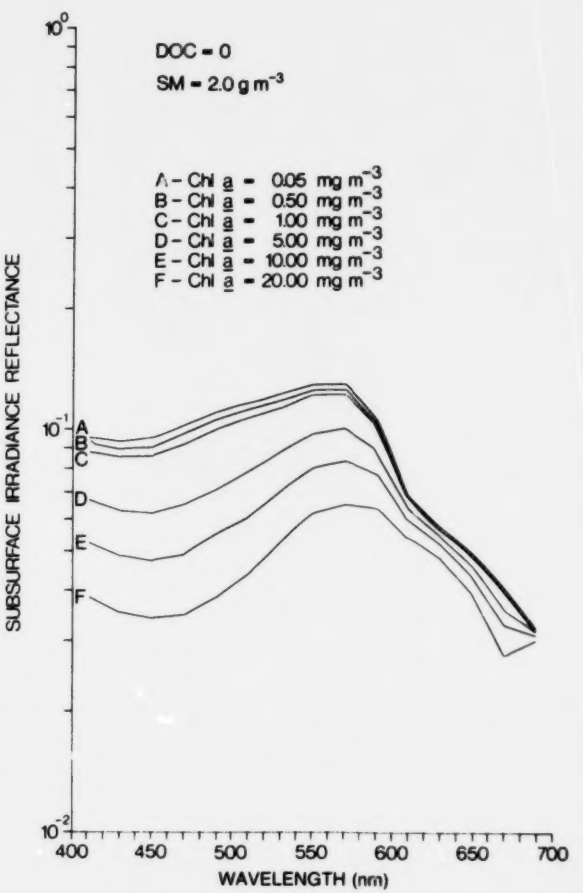

Figure 9. Subsurface irradiance reflectance spectra for various chlorophyll *a* concentrations in a water mass for which the DOC concentration is kept fixed at zero and the total SM concentration, at 2.0 g m^{-3}.

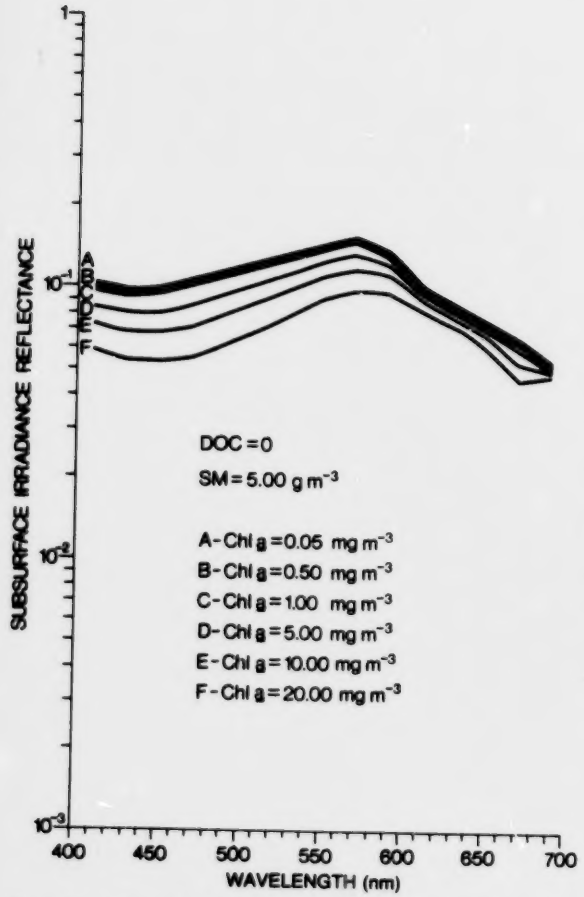

Figure 10. Subsurface irradiance reflectance spectra for various chlorophyll *a* concentrations in a water mass for which the DOC concentration is kept fixed at zero and the total SM concentration, at 5.00 g m^{-3}.

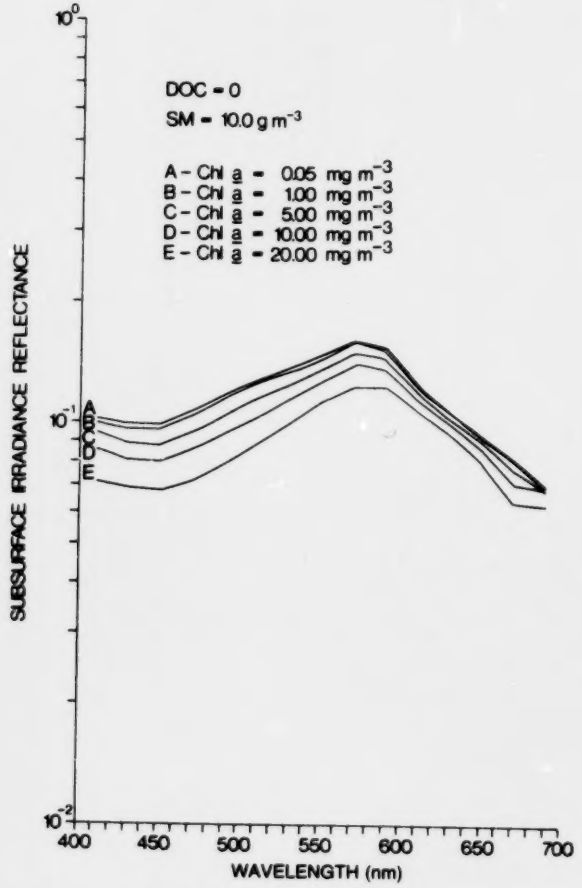

Figure 11. Subsurface irradiance reflectance spectra for various chlorophyll *a* concentrations in a water mass for which the DOC concentration is kept fixed at zero and the total SM concentration, at 10.0 g m^{-3}.

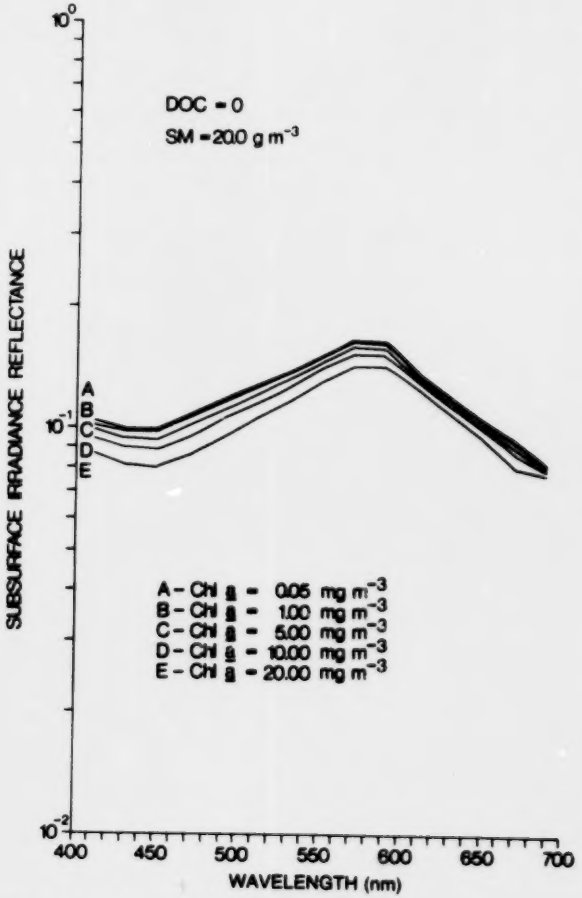

Figure 12 Subsurface irradiance reflectance spectra for various chlorophyll *a* concentrations in a water mass for which the DOC concentration is kept fixed at zero and the total SM concentration, at 20.0 g m^{-3}.

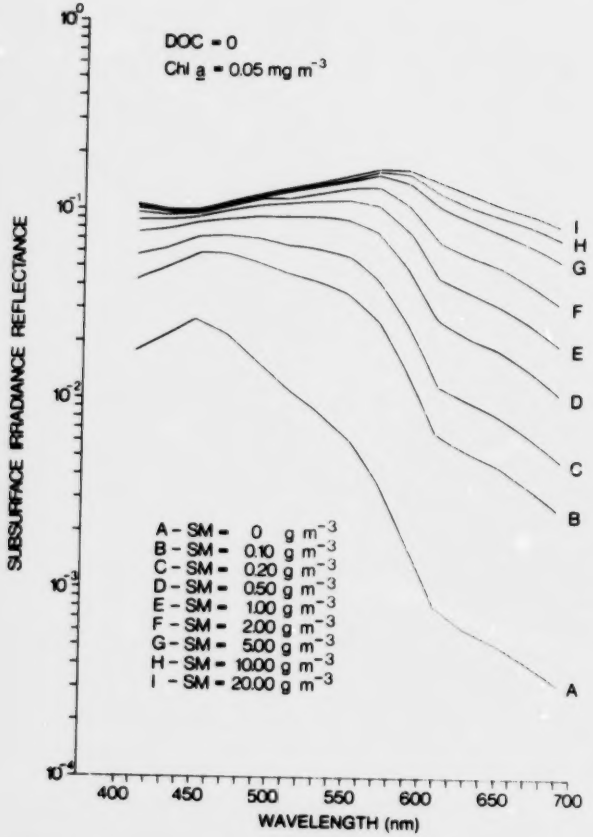

Figure 13. Subsurface irradiance reflectance spectra for various SM concentrations in a water mass containing a small fixed concentration of chlorophyll *a* and zero DOC.

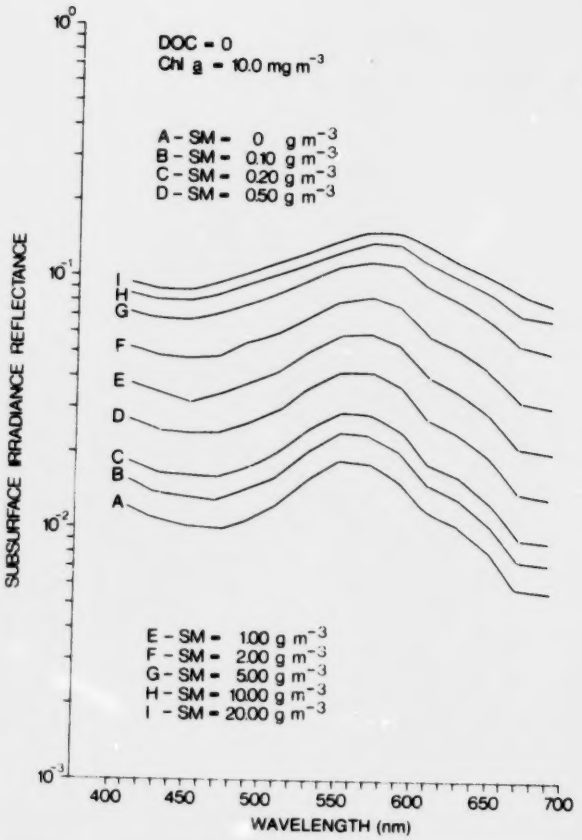

Figure 14. Subsurface irradiance reflectance spectra for various SM concentrations in a water mass containing a large fixed concentration of chlorophyll *a* and zero DOC.

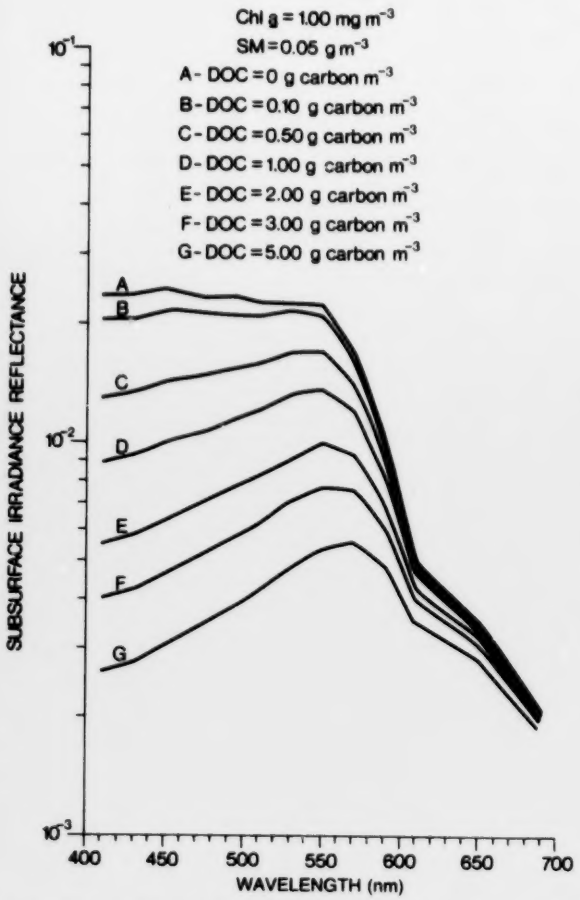

Figure 15. Subsurface irradiance reflectance spectra for various DOC concentrations in a water mass for which the SM concentration is kept fixed at 0.05 g m^{-3} and the chlorophyll *a* concentration, at 1.00 mg m^{-3}.

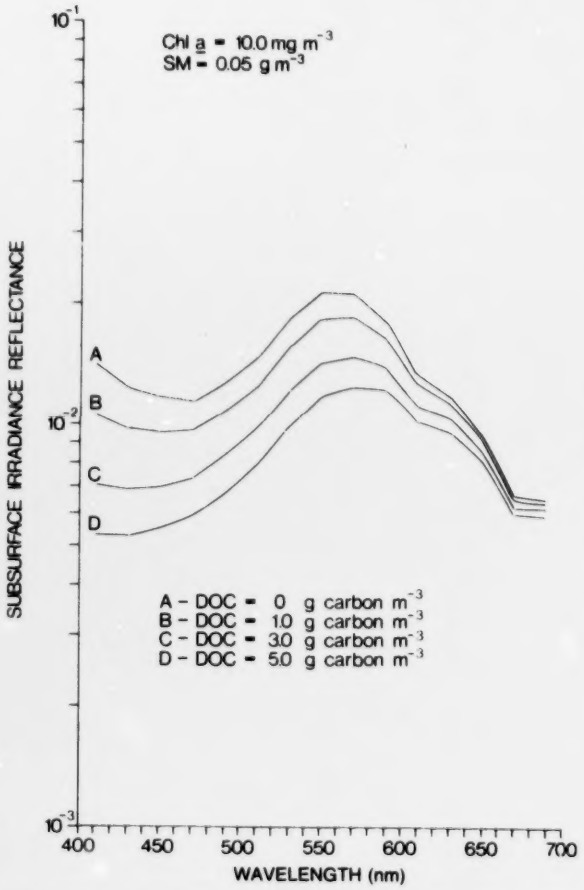

Figure 16. Subsurface irradiance reflectance spectra for various DOC concentrations in a water mass containing a large fixed concentration of chlorophyll *a* (10.0 mg m^{-3}) and a small fixed SM concentration (0.05 g m^{-3}).

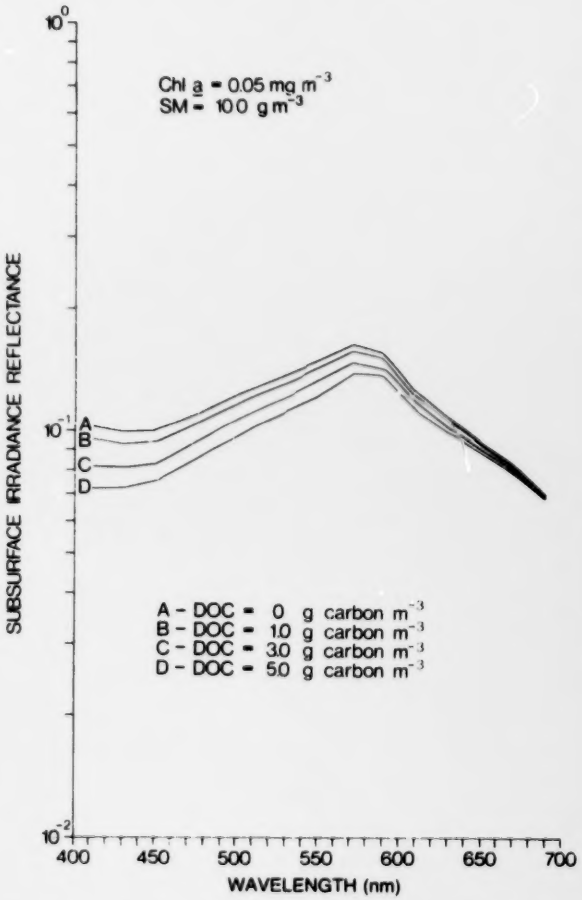

Figure 17. Subsurface irradiance reflectance spectra for various DOC concentrations in a water mass containing a small fixed chlorophyll *a* concentration (0.05 mg m^{-3}) and a large fixed SM concentration (10.0 g m^{-3}).

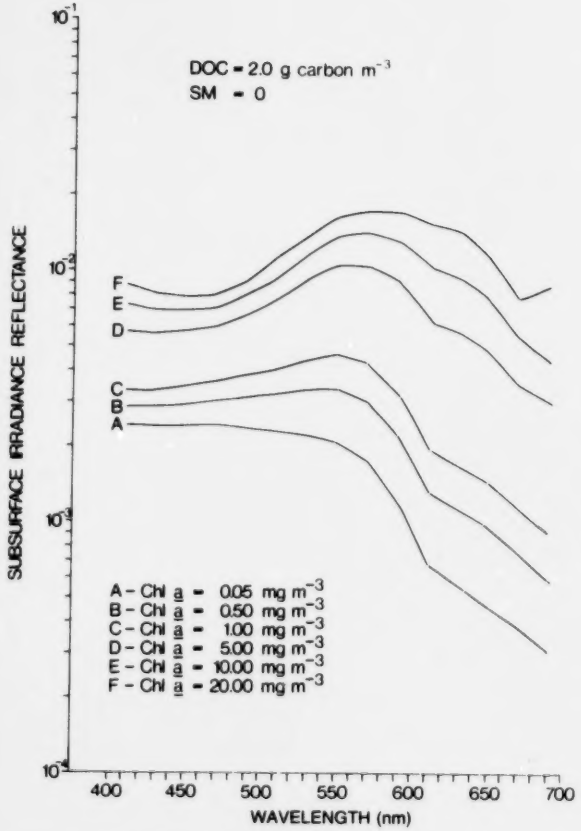

Figure 18. Subsurface irradiance reflectance spectra for various chlorophyll *a* concentrations in a water mass for which the DOC concentration is kept fixed at 2.0 g carbon m^{-3} and the total SM concentration, at zero.

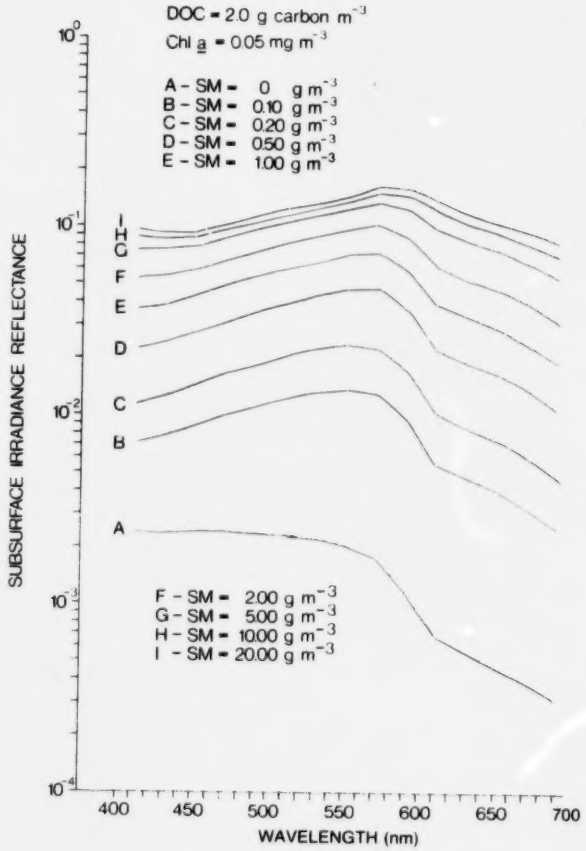

Figure 19. Subsurface irradiance reflectance spectra for various SM concentrations in a water mass for which the DOC concentration is kept fixed at 2.0 g carbon m^{-3} and the chlorophyll *a* concentration, at 0.05 mg m^{-3}.

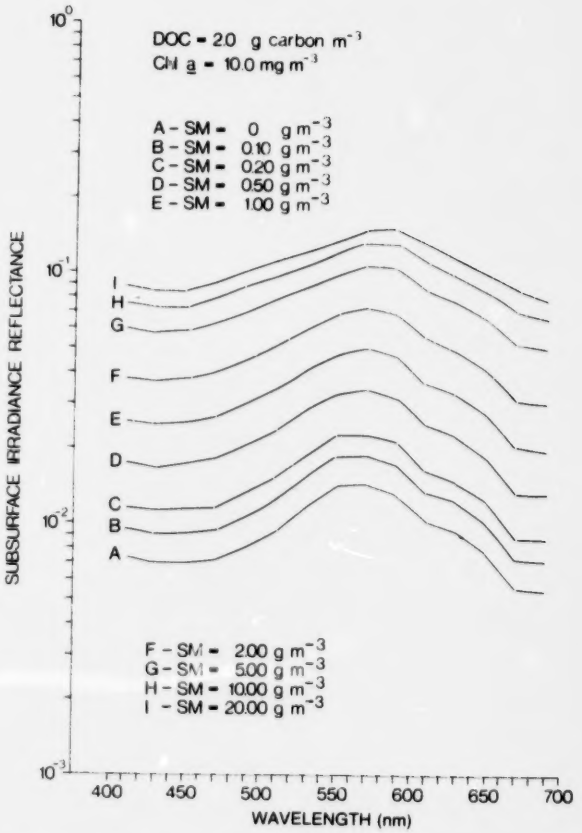

Figure 20. Subsurface irradiance reflectance spectra for various SM concentrations in a water mass for which the DOC concentration is kept fixed at 2.0 g carbon m^{-3} and the chlorophyll *a* concentration, at 10.0 mg m^{-3}.

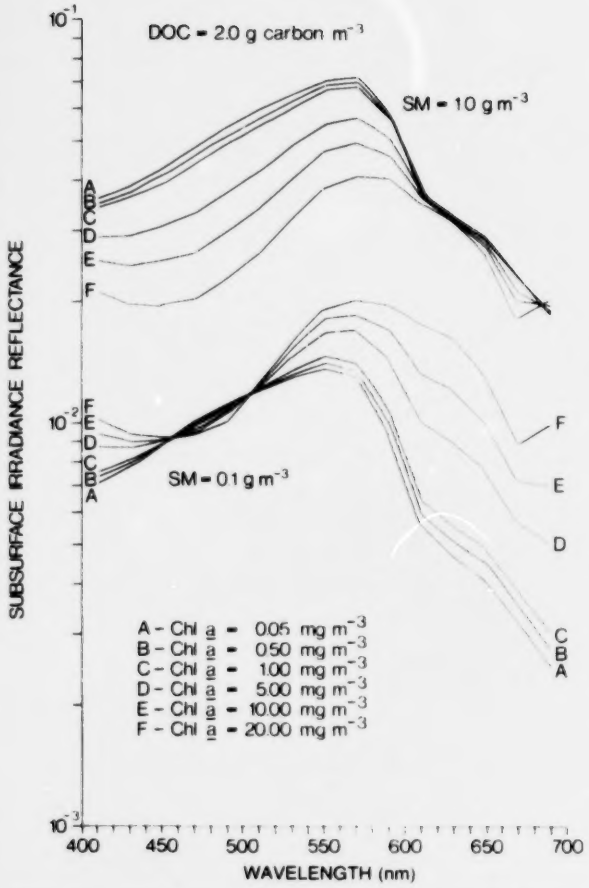

Figure 21. **Subsurface irradiance reflectance spectra for various chlorophyll *a* and SM concentrations in a water mass for which the DOC concentration is kept fixed at 2.0 g carbon m^{-3}.**

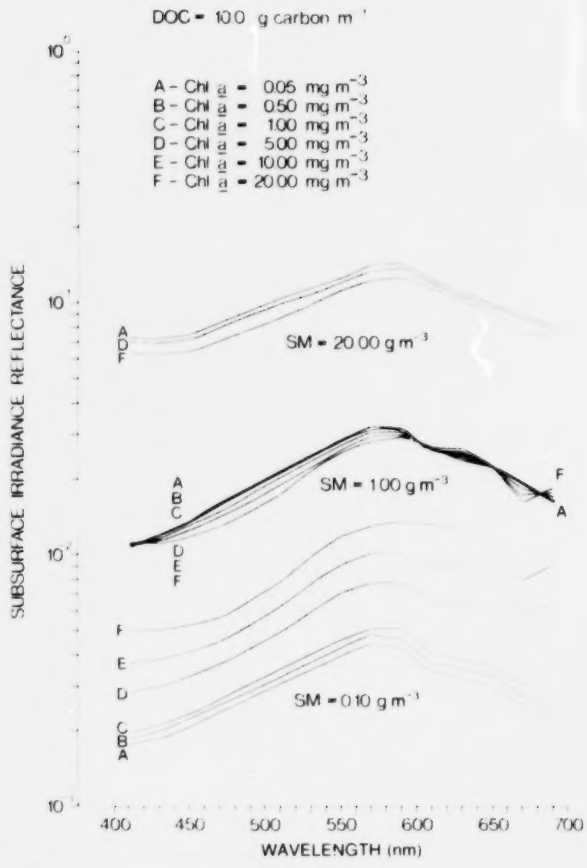

Figure 22. **Subsurface irradiance reflectance spectra for various chlorophyll *a* and SM concentrations in a water mass for which the DOC concentration is kept fixed at 10.0 g carbon m^{-3}.**

SUBSURFACE IRRADIANCE REFLECTANCE AT A SINGLE WAVELENGTH

To this point, this report has considered subsurface irradiance reflectance spectra (410 to 690 nm), and thus assumes an operational capability of determining such an *in situ* spectrum. Much optical research, however, is conducted with single-band subsurface irradiance meters. This section evaluates the possible application of such single-band devices in estimating the water quality parameters from a single measurement of volume reflectance at one wavelength. Since the visible spectrum may be conveniently divided into blue, green and red components, a single wavelength from each of the blue (450 nm), green (570 nm) and red (650 nm) will be utilized as the basis for ensuing discussions.

From the absorption cross section versus wavelength curves of Figure 2, it is evident that the influence of dissolved organic carbon on subsurface irradiance reflectance is the most pronounced in the blue region of the visible spectrum and the least pronounced in the red region. Consequently, a natural water mass may be approximated, to some extent, by a three-component model (namely pure water, chlorophyll, and suspended minerals) at red wavelengths. Therefore, it could be anticipated that estimations of chlorophyll and/or suspended mineral concentrations from a single wavelength measurement of subsurface irradiance reflectance, if possible at all, might display the highest probability of success if the single wavelength selected were in the red portion of the spectrum. That such an anticipation is, in fact, realized, will emerge from the following discussion.

Figure 23 illustrates the family of relationships that exist between the subsurface irradiance reflectance at 450 nm (blue) and the chlorophyll concentration for a water mass in which the DOC concentration is kept fixed at 2.0 g carbon m^{-3} (a not unreasonable average value for many natural water bodies) and the suspended mineral concentration is permitted to vary between 0 and 20 g m^{-3}. Clearly, the subsurface irradiance relectance at 450 nm (blue) is highly insensitive to change of chlorophyll. Similar relationships between the subsurface irradiance reflectance in the blue and chlorophyll concentrations emerge from a consideration of other DOC concentrations, emphasizing the futility of attempting to estimate chlorophyll concentrations from a single subsurface irradiance reflectance at 450 nm.

In a similar manner, Figure 24 illustrates the situations that arise when the subsurface irradiance reflectance at 570 nm (green) is utilized in an attempt to estimate chlorophyll concentration from a single wavelength measurement. Even though the subsurface irradiance reflectance in the green displays a reasonable sensitivity for a water mass which contains no suspended mineral component, this sensitivity rapidly evaporates once even a trace (< 0.10 g m^{-3}) of suspended mineral is present in the aquatic system.

Figure 25 (similar to Figs. 23 and 24) likewise eliminates a single subsurface irradiance measurement at 650 nm (red) as a means of estimating chlorophyll concentrations, although the sensitivity of the subsurface irradiance reflectance for very clear (in terms of suspended mineral concentrations) water masses is slightly higher for the red than for the green wavelength. Therefore from Figures 23 to 25 it is evident that reliable estimates of chlorophyll concentrations cannot result from single wavelength measurements of the subsurface irradiance reflectance (volume reflectance).

Figure 26 illustrates the family of relationships that exist between the subsurface irradiance reflectance at 450 nm (blue) and the suspended mineral concentration for a water mass in which the DOC concentration is kept fixed at 2.0 g carbon m^{-3} and the chlorophyll concentration is permitted to vary from 0.05 to 20.0 mg m^{-3}. A somewhat promising sensitivity of subsurface irradiance reflectance at the blue wavelength to changes in suspended mineral concentration (coupled with the relative insensitivity of this subsurface irradiance reflectance to changes in chlorophyll concentration as indicated in Fig. 24) appears to be suggested by Figure 26. As indicated earlier, however, the maximum impact of DOC manifests in the blue region of the spectrum. This impact is illustrated in Figure 27 wherein the observable range of subsurface irradiance reflectance values at 450 nm (blue) is plotted as a function of suspended mineral concentration for a water body, which may display a range of DOC concentrations between 0 and 5 g carbon m^{-3} and a range of chlorophyll *a* concentrations between 0.05 and 20.0 mg m^{-3}. The sensitivity of the volume reflectance in the blue to changes in suspended mineral concentration quickly loses its initial attractiveness.

The sensitivity of the subsurface irradiance reflectance at 570 nm (green) to changes in suspended mineral concentration for a water mass containing a fixed DOC concentration of 2.0 g carbon m^{-3} is shown in Figure 28 for several values of chlorophyll concentration. The impact of the presence of chlorophyll on the measured subsurface irradiance reflectance at green wavelengths for small suspended mineral concentrations is clearly more pronounced than the corresponding impact of the presence of chlorophyll on the measured subsurface irradiance reflectance at blue wavelengths. However, the volume reflectance at green wavelengths is less sensitive to changes in DOC concentrations than is the volume reflectance at blue wavelengths. Figure 29 (similar to Fig.27) illustrates the observable range

of subsurface irradiance reflectance values at 570 nm (green) plotted as a function of suspended mineral concentration for a water body which may display a range of DOC concentrations between 0 and 5 g carbon m^{-3} and a range of chlorophyll concentrations between 0.05 and 20.0 mg m^{-3}. While the response of the subsurface irradiance reflectance at 570 nm (green) to changes in suspended mineral concentration will not satisfactorily permit a reliable estimation of suspended mineral concentration from a volume reflectance measurement at a single wavelength in the green region of the spectrum, Figure 29 (for green volume reflectance), nonetheless, displays an obvious improvement in sensitivity over Figure 27 for blue volume reflectance.

The sensitivity of the subsurface irradiance reflectance at 650 nm (red) to changes in suspended mineral concentration for a water mass containing a fixed DOC concentration of 2.0 g carbon m^{-3} is shown in Figure 30 for several values of chlorophyll concentration. The large impact of the presence of chlorophyll on the volume reflectance at red wavelengths observed in water masses containing small concentrations of suspended minerals is an obvious feature of Figure 30. However, when the minimal impact of DOC concentrations on the volume reflectance observable in the red region of the spectrum is also considered, the sensitivity curve of Figure 31 may be constructed. Comparable to Figures 27 and 29, Figure 31 illustrates the observable ranges of subsurface irradiance reflectance values at 650 nm (red) plotted as a function of suspended mineral concentration for a water body which may display a range of DOC concentrations between 0 and 5 g carbon m^{-3} and a range of chlorophyll concentrations between 0.05 and 20.0 mg m^{-3}. Clearly, a reasonable sensitivity to suspended mineral concentration may be ascribed to the subsurface irradiance reflectance at 650 nm (red), particularly for suspended mineral concentrations of more than ~0.10 g m^{-3}, and consequently, a single volume reflectance measurement at red wavelengths does appear to possess some capability of estimating suspended mineral concentrations in most natural lake waters.

The asymptotic nature of Figure 31 is also quite apparent. As seen from Equation 7, R(0,650) asymptotically approaches the approximate value $\frac{1}{3} \cdot \frac{Bb(650)}{a(650) + Bb(650)}$ which would render determinations of suspended mineral concentrations of more than ~40 g m^{-3} very hazardous. However, in the general range 0.10 g $m^{-3} < C_{SM} < 40$ g m^{-3}, a single volume reflectance measurement at 650 nm may provide a reasonable estimate of suspended mineral concentration despite the competing optical activity resulting from the simultaneous presence of chlorophyll and dissolved organic material within the water mass.

The sensitivity of the subsurface irradiance reflectance at 650 nm is further improved if such single wavelength *in situ* optical measurements are performed within natural waters that do not display an excessive amount of biological activity (such as oceans, oligotrophic and mesotrophic lakes and rivers). Figure 32 illustrates the observable ranges of subsurface irradiance reflectance values at 650 nm plotted as a function of suspended mineral concentration for a water body in which the chlorophyll concentration range is restricted to $0.05 \leq C_{Chl} \leq 5.0$ mg m^{-3}. The increased sensitivity becomes readily apparent.

In summary, therefore, the optical complexities of inland water bodies present overwhelming obstacles to the use of single wavelength measurements of subsurface irradiance reflectance (volume reflectance) as a means of providing water quality indicators. It is totally infeasible to attempt a reliable estimate of the chlorophyll concentration from such single wavelength *in situ* measurements, irrespective of what wavelength is considered. Similarly, the blue and green regions of the visible spectrum are inappropriate wavelength bands with which to attempt an estimation of suspended mineral concentrations (due, in large part, to the interference from dissolved organic material). Despite severe restrictions resulting from the optical interference of chlorophyll concentrations (particularly at low suspended mineral concentrations), however, single wavelength subsurface irradiance measurements in the red region of the visible spectrum do possess some applicability to the estimation of small to moderate concentrations of suspended minerals.

Therefore, if direct measurements of subsurface irradiance reflectance, do, in fact, possess an application to the determination of water quality indicators, it is evident that the entire subsurface irradiance reflectance spectrum must be considered.

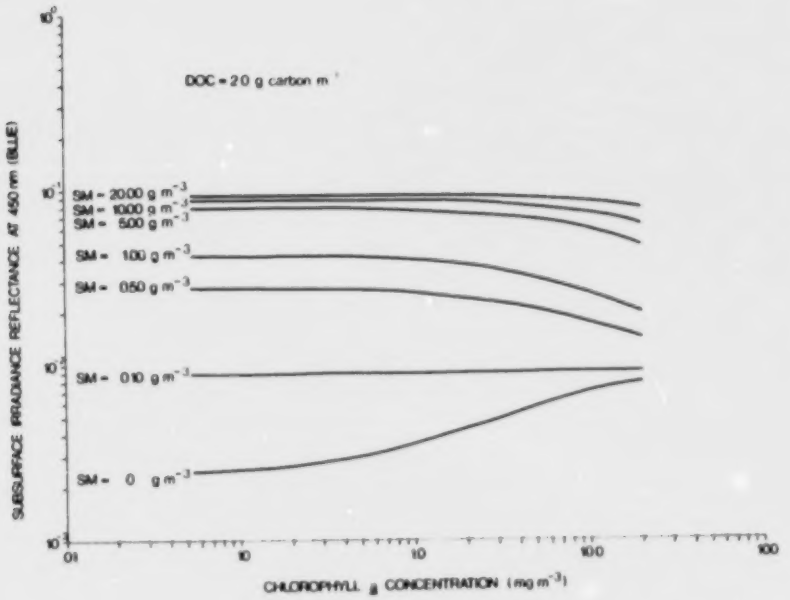

Figure 23. **Relationship between subsurface irradiance reflectance at 450 nm (blue) and chlorophyll *a* concentration for a water mass in which the DOC concentration is kept fixed at 2.0 g carbon m^{-3} and the SM concentration is permitted to vary between zero and 20 g m^{-3}.**

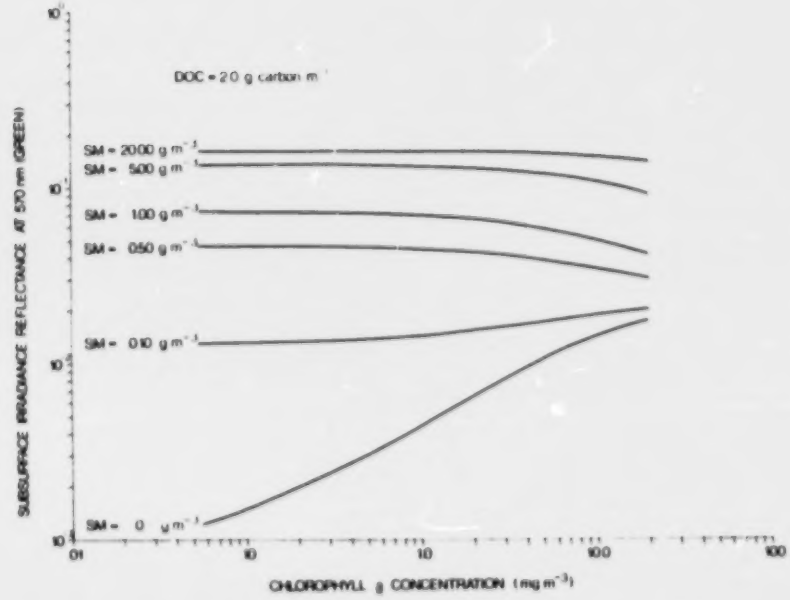

Figure 24. **Relationship between subsurface irradiance reflectance at 570 nm (green) and chlorophyll *a* concentration for a water mass in which the DOC concentration is kept fixed at 2.0 g carbon m^{-3} and the SM concentration is permitted to vary between zero and 20 g m^{-3}.**

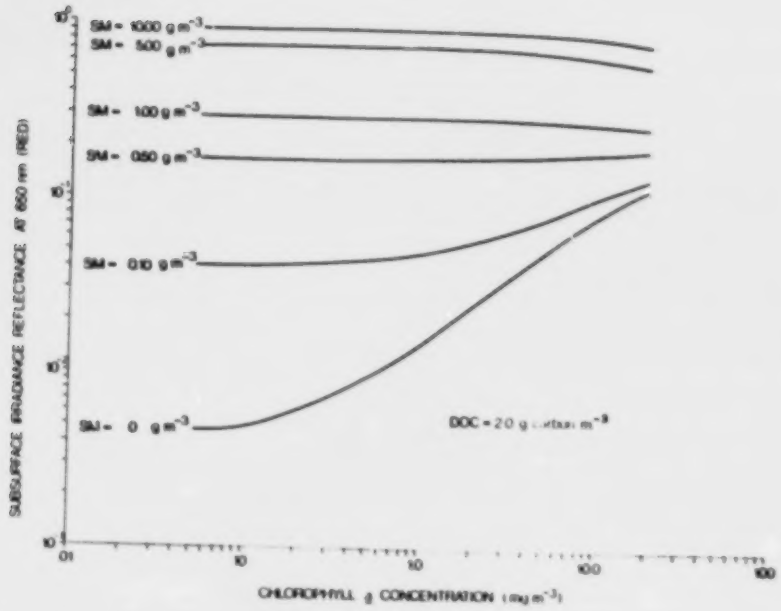

Figure 25. **Relationship between subsurface irradiance reflectance at 650 nm (red) and chlorophyll *a* concentration for a water mass in which the DOC concentration is kept fixed at 2.0 g carbon m^{-3} and the SM concentration is permitted to vary between zero and 10 g m^{-3}.**

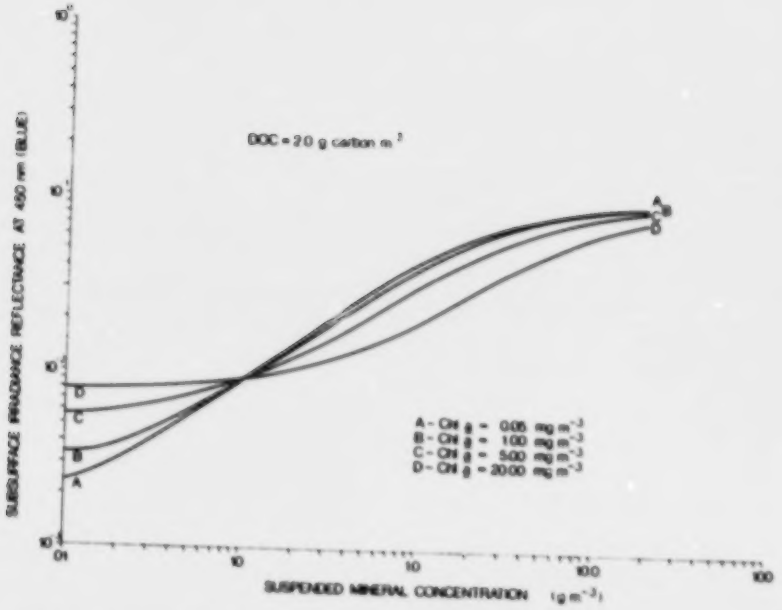

Figure 26. **Relationship between subsurface irradiance reflectance at 450 nm (blue) and SM concentration for several discrete values of chlorophyll *a* concentration in a water mass for which the DOC concentration is kept fixed at 2.0 g carbon m^{-3}.**

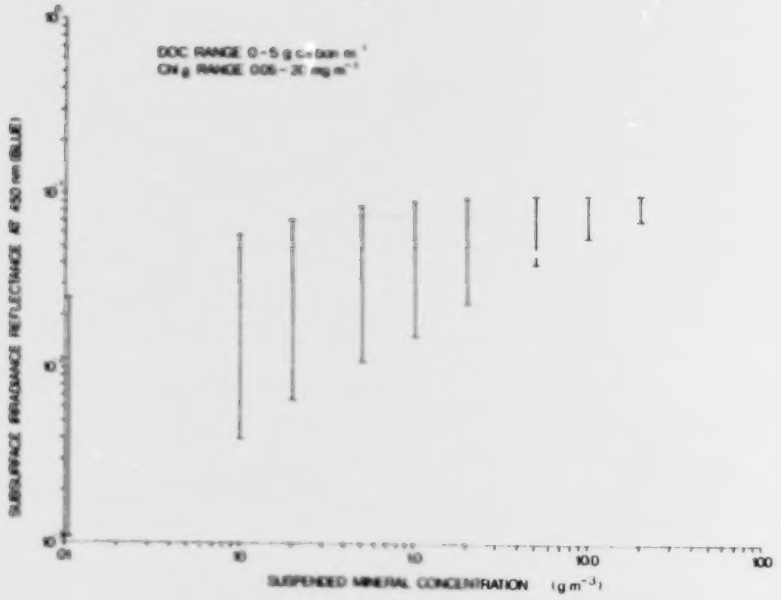

Figure 27. Relationship between subsurface irradiance reflectance at 450 nm (blue) and SM concentration for a water mass in which the DOC concentration is permitted to vary between zero and 5 g carbon m^{-3} and the chlorophyll *a* concentration, to vary between 0.05 and 20.0 mg m^{-3}.

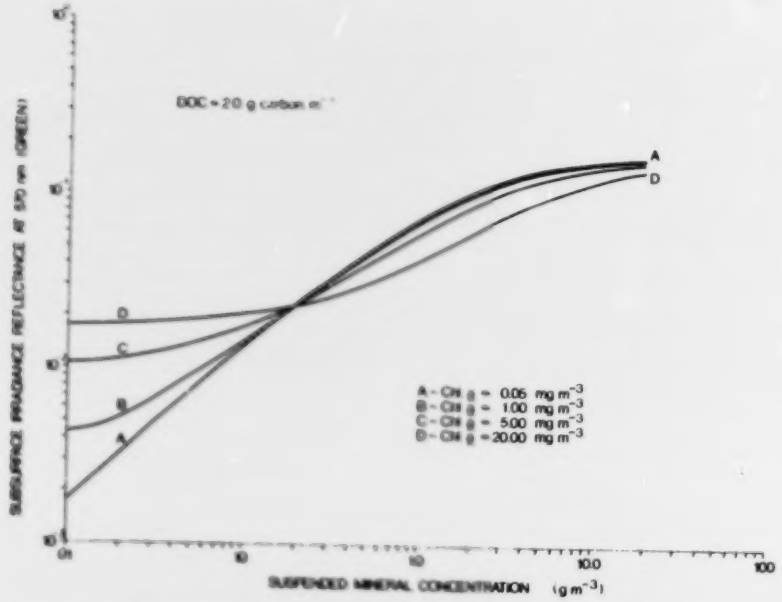

Figure 28. Relationship between subsurface irradiance reflectance at 570 nm (green) and SM concentration for several discrete values of chlorophyll *a* concentration in a water mass for which the DOC concentration is kept fixed at 2.0 g carbon m^{-3}.

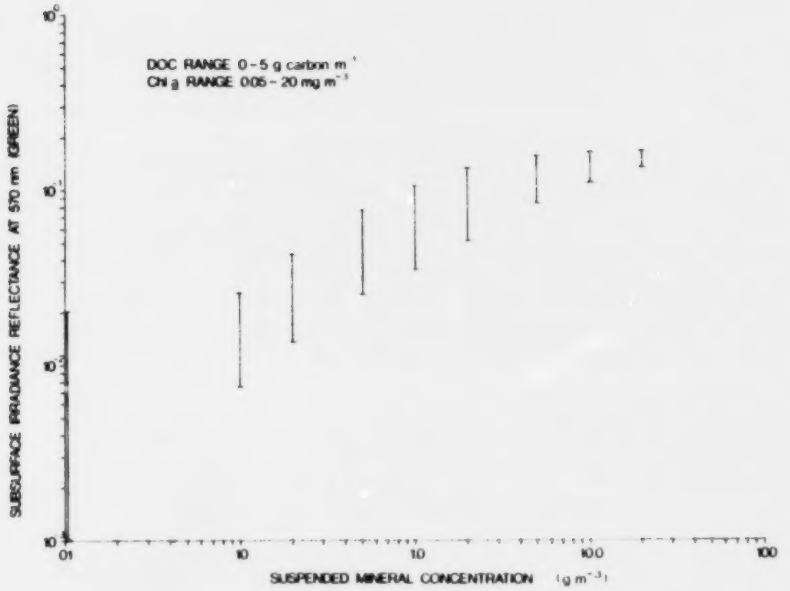

Figure 29. **Relationship between subsurface irradiance reflectance at 570 nm (green) and SM concentration for a water mass in which the DOC concentration is permitted to vary between zero and 5 g carbon m^{-3} and the chlorophyll *a* concentration, to vary between 0.05 and 20.0 mg m^{-3}.**

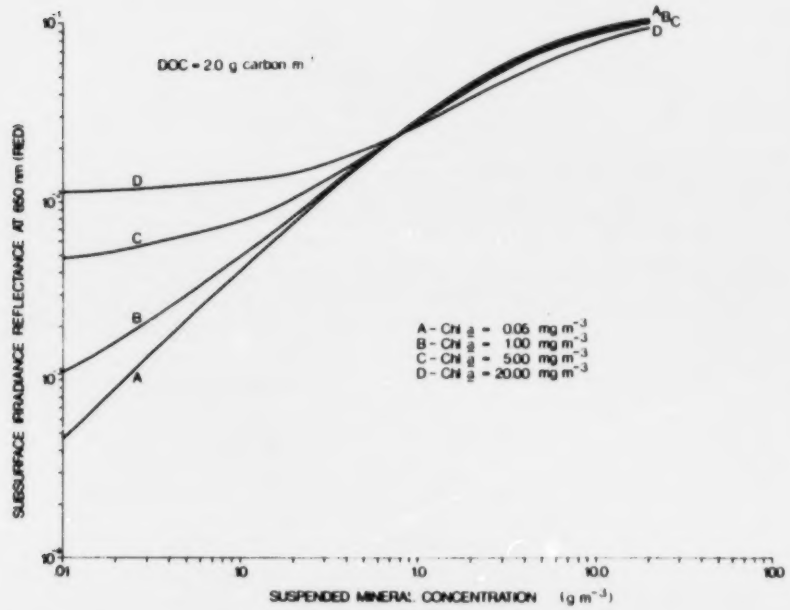

Figure 30. **Relationship between subsurface irradiance reflectance at 650 nm (red) and SM concentration for several discrete values of chlorophyll *a* concentration in a water mass for which the DOC concentration is kept fixed at 2.0 g carbon m^{-3}.**

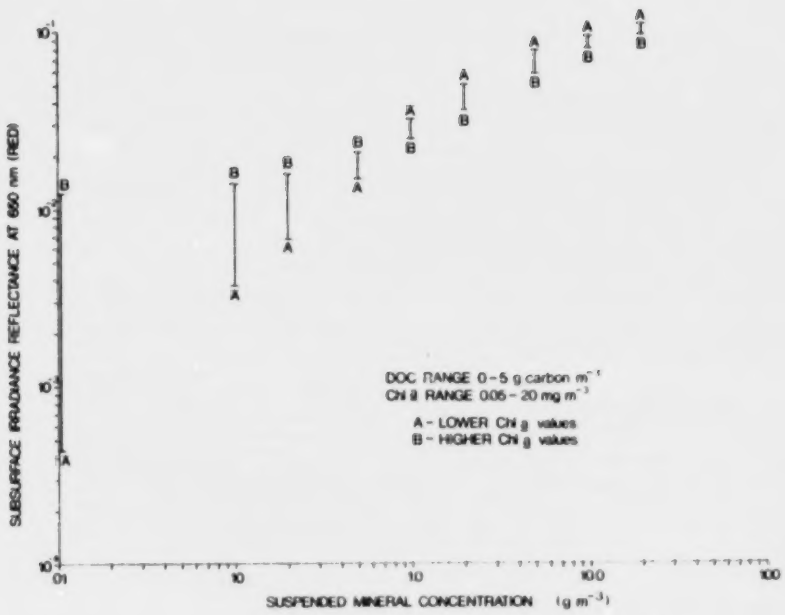

Figure 31. **Relationship between subsurface irradiance reflectance at 650 nm (red) and SM concentration for a water mass in which the DOC concentration is permitted to vary between zero and 5 g carbon m^{-3} and the chlorophyll *a* concentration, to vary between 0.05 and 20.0 mg m^{-3}.**

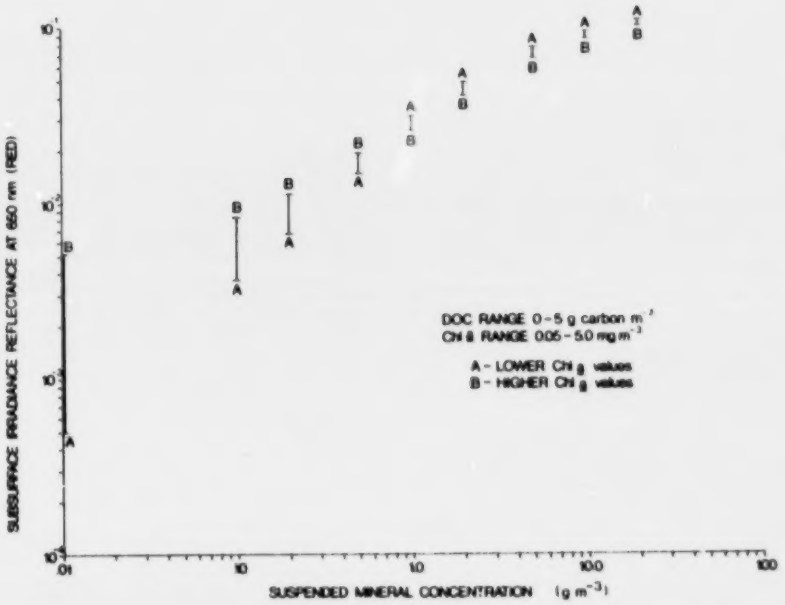

Figure 32. **Relationship between subsurface irradiance reflectance at 650 nm (red) and SM concentration for a water mass in which the DOC concentration is permitted to vary between zero and 5 g carbon m^{-3} and the chlorophyll *a* concentration, to vary between 0.05 and 5.0 mg m^{-3}.**

RELATIONSHIPS AMONG OPTICAL AND WATER QUALITY PARAMETERS

This section will attempt to define, in mathematical terms, the interrelationships between the volume reflectance and the water quality parameters. That is, it investigates the effect on observed volume reflectance spectra of varying chlorophyll, suspended mineral, and dissolved organic carbon concentrations simultaneously. The resulting equations will illustrate the difficulties encountered in attempting a mathematical determination of the water quality parameters from direct measurements of the volume reflectance (subsurface irradiance reflectance) spectrum, indicating the need for a multivariate optimization technique for the extraction of water quality information from such optical spectra. Consequently, the reader may choose to disregard the discussions presented in this section and proceed directly to the next section with no loss of continuity.

Consider a homogeneous water mass made up of concentrations of water, chlorophyll, suspended minerals, and dissolved organic carbon given by C_w, C_{Chl}, C_{SM} and C_{DOC}, respectively. The volume reflectance at wavelength λ, $R(\lambda)$ will be a function of these concentrations and the optical cross sections, that is:

$$R(\lambda) = f(C_w a_w,\ C_{Chl}a_{Chl},\ C_{SM}a_{SM},\ C_{DOC}a_{DOC},\ C_w(Bb)_w,\ C_{Chl}(Bb)_{Chl},\ C_{SM}(Bb)_{SM}) \quad (8)$$

where the wavelength dependence of the optical cross sections has been dropped for simplicity of notation.

The rate of change of volume reflectance with wavelength (i.e., the slope of the measured volume reflectance spectrum at wavelength λ), $\frac{dR(\lambda)}{d\lambda}$, is therefore defined as:

$$\frac{dR(\lambda)}{d\lambda} = \frac{\partial R}{\partial a_w} \cdot \frac{\partial a_w}{\partial \lambda} + C_{Chl}\frac{\partial R}{\partial a_{Chl}} \cdot \frac{\partial a_{Chl}}{\partial \lambda} + C_{SM}\frac{\partial R}{\partial a_{SM}} \cdot \frac{\partial a_{SM}}{\partial \lambda} + C_{DOC}\frac{\partial R}{\partial a_{DOC}} \cdot \frac{\partial a_{DOC}}{\partial \lambda} + \frac{\partial R}{\partial (Bb)_w} \cdot \frac{\partial (Bb)_w}{\partial \lambda} + C_{Chl}\frac{\partial R}{\partial (Bb)_{Chl}} \cdot \frac{\partial (Bb)_{Chl}}{\partial \lambda} + C_{SM}\frac{\partial R}{\partial (Bb)_{SM}} \cdot \frac{\partial (Bb)_{SM}}{\partial \lambda} \quad (9)$$

where C_w has been set to 1, and the partial derivatives of the optical cross sections (which are a function of λ) are defined by the shapes of the curves illustrated in Figures 2 and 3 (with the exception of Figure 3, in which each point would be multiplied by its appropriate $B(\lambda)$).

From Equation 7, the volume reflectance $R(\lambda)$ is given by:

$$R(\lambda) = \sum_{n=0}^{3} r_n \left[\frac{(\partial b)(\lambda)}{a(\lambda) + (Bb)(\lambda)}\right]^n = \sum_{n=0}^{3} r_n \left[\frac{u(\lambda)}{v(\lambda)}\right]^n \quad (10)$$

where $u(\lambda) = (Bb)_w + C_{Chl}(Bb)_{Chl} + C_{SM}(Bb)_{SM}$

$$v(\lambda) = a_w + C_{Chl}a_{Chl} + C_{SM}a_{SM} + C_{DOC}a_{DOC} + (Bb)_w + C_{Chl}(Bb)_{Chl} + C_{SM}(Bb)_{SM}$$

Partially differentiating Equation 10 with respect to each of the optical cross sections yields:

$$\frac{\partial R}{\partial a_w} = -\frac{Nu}{v^2}$$

$$\frac{\partial R}{\partial a_{Chl}} = -\frac{N C_{Chl} u}{v^2}$$

$$\frac{\partial R}{\partial a_{SM}} = -\frac{N C_{SM} u}{v^2}$$

$$\frac{\partial R}{\partial a_{DOC}} = -\frac{N C_{DOC} u}{v^2} \quad (11)$$

$$\frac{\partial R}{\partial (Bb)_w} = \frac{N(v-u)}{v^2}$$

$$\frac{\partial R}{\partial (Bb)_{Chl}} = \frac{N C_{Chl}(v-u)}{v^2}$$

$$\frac{\partial R}{\partial (Bb)_{SM}} = \frac{N C_{SM}(v-u)}{v^2}$$

where $N = r_1 + 2r_2\frac{u}{v} + 3r_3\frac{u^2}{v^2}$

and r_1, r_2 and r_3 are the coefficients of expansion from Equation 7.

Substituting Equation set 11 into Equation 9 yields:

$$\frac{dR(\lambda)}{d\lambda} = -\frac{Nu}{v^2}\left[\frac{\partial a_w}{\partial\lambda} + C_{Chl}{}^2\,\frac{\partial a_{Chl}}{\partial\lambda}\right.$$

$$\left. + C_{SM}{}^2\,\frac{\partial a_{SM}}{\partial\lambda} + C_{DOC}{}^2\,\frac{\partial a_{DOC}}{\partial\lambda}\right]$$

$$+\frac{N(v-u)}{v^2}\left[\frac{\partial (Bb)_w}{\partial\lambda} + C_{Chl}{}^2\,\frac{\partial (Bb)_{Chl}}{\partial\lambda}\right.$$

$$\left. + C_{SM}{}^2\,\frac{\partial (Bb)_{SM}}{\partial\lambda}\right] \qquad (12)$$

where u, v and N are functions of C_{Chl}, C_{SM} and C_{DOC}, as defined above.

Equation 12 then relates the slope of a directly measured subsurface irradiance reflectance spectrum at wavelength λ to the concentrations of chlorophyll, suspended minerals, and dissolved organic carbon generating that observed spectrum. Obvious difficulties exist in attempting to apply Equation 12 (say, at three discrete values of λ) to estimate, from three simultaneous equations, the values of C_{Chl}, C_{SM} and C_{DOC} describing the water mass. From the nature of the wavelength dependencies of the optical cross sections, it is clear that not only are judicious choices of λ's required but so are very accurate determinations of the slopes. Furthermore, very accurate values of $\frac{dR(\lambda)}{d\lambda}$ are also mandatory, and as is evident, these slope values may be small numerically (in addition to being either positive or negative). Further, the values of N, v and u are themselves functions of C_{Chl}, C_{SM} and C_{DOC} (the parameters being sought). Yet this latter problem may be overcome, at least in principle. Since $u(\lambda) = (Bb)(\lambda)$ and $v(\lambda) = a(\lambda) + (Bb)(\lambda)$, a determination of the bulk inherent properties $(Bb)(\lambda)$ (total backscattering coefficient) and $a(\lambda)$ (total absorption coefficient) in the manner described in the earlier sections of this report can provide the required values of u, v and N.

Clearly, therefore, Equation 12 has, in principle, the capability of providing three equations (at three judiciously selected wavelengths) which may be simultaneously solved for the water quality indicators C_{Chl}, C_{SM} and C_{DOC}. However, the severe onus placed upon precisely determining small values of slopes in both measured and available optical parameter spectra would adversely impact the reliability and reproducibility of such a mathematical calculation. The need to determine $a(\lambda)$ and $(Bb)(\lambda)$ along with each *in situ* measurement of the subsurface irradiance spectrum further renders the use of Equation 12 unattractive. Ideally, a method of extracting the desired water quality indicators from a single measurement of the volume reflectance spectrum should be sought and used. Such a method is described in the next section.

MULTIVARIATE OPTIMIZATION TECHNIQUE

The fundamental problem to be solved is as follows: Given a directly measured subsurface irradiance reflectance spectrum $R(0,\lambda)$, which may be mathematically defined by Equation 7 (i.e. $R(0,\lambda)$ as an expanded function of $a(\lambda)$ and $Bb(\lambda)$, themselves functions of the optical cross sections and the concentrations of chlorophyll, suspended minerals, and DOC), find the values of chlorophyll, suspended minerals, and DOC that generate a subsurface irradiance reflectance spectrum most closely resembling the measured spectrum.

Clearly, a multivariate optimization technique appropriate for estimating "best fit" concentrations of chlorophyll, suspended minerals and dissolved organic carbon should also have application to the solution of an inverse problem, namely: Given directly measured subsurface irradiance spectra and the corresponding concentrations of chlorophyll, suspended minerals and dissolved organic carbon which contribute to the observation of such spectra, find the values of absorption and scattering cross sections (as a function of λ) that generate a subsurface irradiance reflectance most closely resembling the measured spectrum.

This section details the nature of the multivariate optimization technique employed by the Environmental Optics Section of the National Water Research Institute in (a) attempting an extraction of water quality indicators from *in situ* measurements of the subsurface irradiance reflectance spectra in the range 400 to 700 nm and (b) attempting a determination of the optical cross sections from *in situ* measurements of the subsurface irradiance reflectance and water quality measurements performed in concert with the optical measurements.

Some of the mathematical difficulties associated with attempting an analytical solution of Equation 7 have been outlined in the preceding section. However, numerical techniques exist which can circumvent such complexities.

Rewriting Equation 7 in vector form yields:

$$R(0,\underline{a}(\lambda),\underline{Bb}(\lambda),\underline{C}) = \sum_{n=0}^{3} r_n(0)\,[\,1+(\underline{a}(\lambda)\cdot\underline{C})/(\underline{Bb}(\lambda)\cdot\underline{C})\,]^{-n} \qquad (13)$$

where

$$\underline{a}(\lambda) = (a_w(\lambda), a_{Chl}(\lambda), a_{SM}(\lambda), a_{DOC}(\lambda))$$

$$\underline{Bb}(\lambda) = (Bb_w(\lambda), Bb_{Chl}(\lambda), Bb_{SM}(\lambda), 0)$$

$$\underline{C} = (1, C_{Chl}, C_{SM}, C_{DOC})$$

Given a measured spectrum $\{S_i\}$ consisting of a set of irradiance reflectances at discrete values of λ (e.g. the 15-point spectrum from 410 to 690 nm in 20-nm increments), the weighted residuals between the measured and theoretical volume reflectances $R(0,\underline{a}_i,\underline{Bb}_i,\underline{C})$ can be written as

$$g_i(\underline{C}) = [S_i - R(0,\underline{a}_i,\underline{Bb}_i,\underline{C})]/R(0,\underline{a}_i,\underline{Bb}_i,\underline{C}) \qquad (14)$$

Here it is assumed that the absorption and backscatter vector functions $\underline{a}$ and $\underline{Bb}$ are known for the homogeneous water mass under consideration, and it is desired to find (at the wavelengths corresponding to $\{S_i\}$) the multidimensional least-squares solution by minimizing over $\underline{C}$ the function

$$f(\underline{C}) = \sum_i g_i^2(\underline{C}) \qquad (15)$$

The value of the concentration vector $\underline{C}$ for which $f(\underline{C})$ is the minimum will then be accepted as defining the parameter concentrations for the water mass that produced the measured subsurface irradiance reflectance spectrum $\{S_i\}$.

The subroutine ZXSSQ (one of the routines available in the International Mathematical and Statistical Library [IMSL, 1980]) is a Levenberg-Marquardt finite difference algorithm appropriate for such multivariate non-linear least-squares optimization applications (Levenberg, 1944; Marquardt, 1963). Given a suitable initial value $\underline{C}_o$, the algorithm will systematically determine a local minimum of $f(\underline{C})$. This value of $f(\underline{C})$ may not, however, be the smallest achievable over the valid range of $\underline{C}$. Consequently, numerous starting points $\{\underline{C}_{oj}\}$ are chosen and the algorithm is permitted to determine the corresponding minima $\{f_j(\underline{C})\}$. The $\underline{C}$ associated with the minimum $f_j(\underline{C})$ of this set is then selected as the appropriate solution. Yet there is no guarantee that any particular starting point $\underline{C}_{oj}$ will result in the algorithm successfully finding any minimum for $f(\underline{C})$, since the algorithm may diverge. Furthermore, a $\underline{C}$ may be found which, although mathematically satisfactory, is physically meaningless (e.g. negative concentrations). To obviate such difficulties, suggestions in the IMSL program notes were implemented in which constraints are placed on $\underline{C}$ such that

$$C_{iMIN} < C_i < C_{iMAX} \qquad \text{for } i = 2,3,4$$

where the subscript i refers to the ith component of the water mass (e.g. $C_2 = C_{Chl}$, $C_3 = C_{SM}$ and $C_4 = C_{DOC}$), and a transformation from the constrained $\underline{C}$ space to an unconstrained $\underline{W}$ space ($-\infty < W_i < +\infty$) is effected using the error function relationship

$$C_i = C_{iMIN} + (C_{iMAX} - C_{iMIN})(1 + \text{erf}(W_i))/2 \qquad (16)$$

The Levenberg-Marquardt algorithm may also be used in a similar manner to extract the parameter cross sections from a set of volume reflectance and concentration measurements. For this application Equation 7 can be rewritten as:

$$R(0,\underline{C}(\underline{u}),\underline{X}) = \sum_{n=0}^{3} r_n(0)\,[1 + (\underline{C}(\underline{u})\cdot\underline{X})/(\underline{C}'(\underline{u})\cdot\underline{X})]^{-n} \qquad (17)$$

where

$$\underline{X} = (a_w, a_{Chl}, a_{SM}, a_{DOC}, Bb_w, Bb_{Chl}, Bb_{SM}, 0)$$

$$\underline{C}(\underline{u}) = (1, C_{Chl}(\underline{u}), C_{SM}(\underline{u}), C_{DOC}(\underline{u}), 0, 0, 0, 0)$$

$$\underline{C}'(\underline{u}) = (0, 0, 0, 0, 1, C_{Chl}(\underline{u}), C_{SM}(\underline{u}), C_{DOC}(\underline{u}))$$

Here $\underline{u}$ is the vector defining the geographical position of the concentration vector $\underline{C}(\underline{u})$, and $\underline{C}'(\underline{u})$ is merely a rotation of $\underline{C}(\underline{u})$ in the multidimensional space.

Given a set of volume reflectance data $\{S_j\}$ at a wavelength, λ_i, and the corresponding concentration data $\{\underline{C}_j\}$ at a number, j, of stations for which we assume the cross sections are invariant, the weighted residuals, $g_j(\underline{X})$, can be formed:

$$g_j(\underline{X}) = [S_j - R(0,\underline{C}_j,\underline{X})]/R(0,\underline{C}_j,\underline{X}) \qquad (18)$$

and the least-squares solution is again found by minimizing over $\underline{X}$ the function

$$f(\underline{X}) = \sum_j g_j^2(\underline{X}) \qquad (19)$$

As before, appropriate constraints are placed on $\underline{X}$

$$X_{iMIN} < X_i < X_{iMAX} \qquad \text{for } i = 1,2\ldots7$$

(e.g. $X_1 = a_w$, $X_2 = a_{Chl}$ . . . . . $X_7 = Bb_{SM}$)

and the algorithm is permitted to operate in $\underline{W}$ space according to the error function transformation

$$X_i = X_{iMIN} + (X_{iMAX} - X_{iMIN})(1 + \text{erf}(W_i))/2 \qquad (20)$$

The resulting least-squares solution for $\underline{X}$ is, of course, applicable only to the specific wavelength of the $\{S_j\}$ used,

and the same procedure must be repeated substituting the $\{S_j\}$ corresponding to each wavelength at which $\underline{X}$ is desired. In this way it is possible to determine the entire cross-section spectrum $\underline{X}(\lambda)$.

Although a similar Levenberg-Marquardt procedure is utilized in each instance, the determination of $\underline{X}$ is intrinsically more complex than the determination of $\underline{C}$, since the number of dimensions defining $\underline{X}$ space is double the number of dimensions defining $\underline{C}$ space. A 15-point volume reflectance spectrum from a single station is adequate to enable the extraction of the three variable components of $\underline{C}$ for that station. However, data from considerably more than 15 stations are necessary to extract the seven variable components of $\underline{X}$ and yet successfully avoid divergence of the algorithm. In the absence of a sufficient number of stations, the dimensionality of the $\underline{X}$ extraction must be reduced by supplying fixed cross-section values for some of the $\underline{X}$ components (e.g., the absorption and backscatter cross-section spectra of pure water can be used for a_w and Bb_w).

An additional complication that may arise in the determination of the cross-section spectrum $\underline{X}(\lambda)$ will occur at wavelengths where the absorption and/or backscatter cross section of a component decreases to such an extent that the component's contribution to the volume reflectance becomes comparable in magnitude to the uncertainties in the measured data. The Levenberg-Marquardt algorithm will then be incapable of unambiguously determining the cross section for that component and will instead yield one of the constraint boundaries X_{iMIN} or X_{iMAX}. This also results in the determined cross sections of the other components being unreliable at these wavelengths. Such gaps in the spectrum of $\underline{X}(\lambda)$ may be filled by interpolation or extrapolation utilizing the successfully calculated portions of the $\underline{X}(\lambda)$ spectrum.

Thus, the concentration vector $\underline{C}$ may be efficiently extracted from a given measured volume reflectance spectrum, and in a similar manner the cross-section spectrum $\underline{X}(\lambda)$ may be determined from volume reflectance and concentration data.

APPLICATION OF A WATER QUALITY MODEL TO THE ESTIMATION OF CHLOROPHYLL, SUSPENDED MINERAL, AND DISSOLVED ORGANIC CARBON CONCENTRATIONS IN LAKE ONTARIO

An independent data set of water quality parameters and subsurface irradiance reflectance spectra was obtained in western Lake Ontario, also during the 1979 field season. Using the directly measured optical spectra, the optical cross sections (for the four-component model) depicted in Figures 2 and 3, and the Levenberg-Marquardt multivariate optimization technique discussed in the preceding section, concentrations of suspended minerals, dissolved organic carbon, and chlorophyll *a* (uncorrected for phaeophytin contamination) were predicted and these values compared with the values obtained from laboratory analyses of water samples collected at the same time the optical spectra were measured.

Figure 33 illustrates the comparison between predicted and directly measured suspended mineral concentrations so obtained. The cone of predictability, defined by the dotted lines, represents a predictability to within a factor of two about the line of exact predictability, i.e. a predictability uncertainty of $\pm\log 2$.

Figures 34 and 35 illustrate, in a corresponding manner, the comparison between predicted and directly measured dissolved organic carbon and chlorophyll *a* concentrations, respectively.

It is seen from Figures 33 to 35 that

(a) The four-component water quality model and the optical cross sections of Figures 2 and 3 yield excellent predictive capabilities for suspended mineral concentrations and possibly acceptable predictive capabilities for dissolved organic carbon concentrations.

(b) Predictive capabilities of the four-component water quality model and the optical cross sections of Figures 2 and 3 appear to be virtually nonexistent for chlorophyll *a* concentrations.

Clearly, from Figure 35 (which is characterized by a dramatic underprediction of the chlorophyll *a* concentration) it is seen that near-zero values of chlorophyll *a* concentrations appear not only to satisfy the Levenberg-Marquardt optimization process but also not to interfere with the prediction of reasonable values of both suspended mineral and dissolved organic carbon concentrations. This suggests three salient possibilities: (i) subsurface volume reflectance spectra directly measured in Lake Ontario may be satisfactorily simulated (in general) by varying only concentrations of suspended minerals and dissolved organic carbon; (ii) (which is actually a variation of (i)) the optical cross sections of chlorophyll *a* are less effective in determining the optical properties of inland lakes (particularly for small concentrations of chlorophyll) than are the optical properties of suspended mineral and dissolved organic carbon concentrations; and (iii) the optical cross sections for chlorophyll (taken from Figs. 2 and 3 and

determined for Lake Ontario from the first data set) are inappropriate for the second data set. In reality, all three suggested possibilities are indeed correct, as will be discussed below.

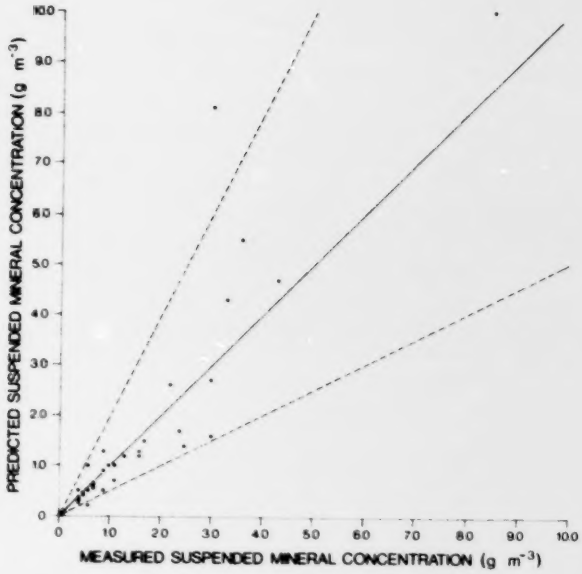

Figure 33. Comparison between predicted and directly measured SM concentrations (using the cross sections of Figs. 2 and 3).

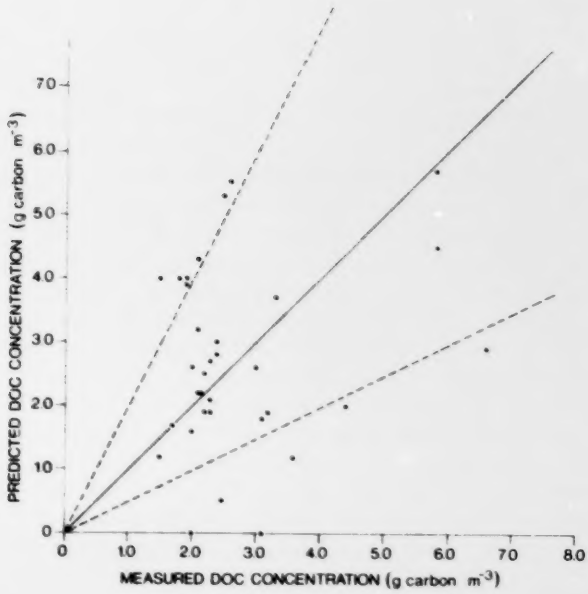

Figure 34. Comparison between predicted and directly measured DOC concentrations (using the cross sections of Figs. 2 and 3).

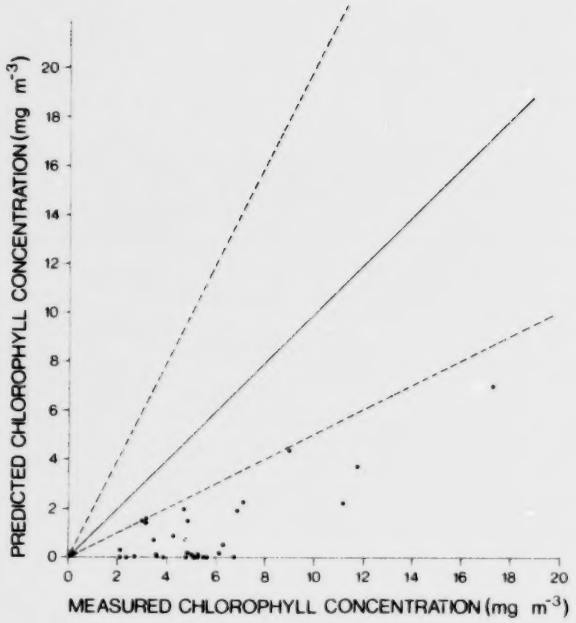

Figure 35. Comparison between predicted and directly measured chlorophyll *a* concentrations (using the cross sections of Figs. 2 and 3).

Suggestion (i) is depicted in Figure 36. Therein are shown both the calculated "best fit" subsurface irradiance optical spectrum (joined points) and the experimentally measured subsurface irradiance reflectance spectrum (unjoined points) for a typical relatively nearshore station (within the Niagara plume) in western Lake Ontario. The predicted (calculated) water quality parameters resulting in the "best fit" spectrum are listed, along with the measured values of the water quality parameters at that station, and it is immediately seen that the Levenberg-Marquardt analyses supplied reasonable values of suspended mineral and DOC concentrations while predicting a zero concentration of chlorophyll *a*.

The presence of chlorophyll in the water mass in this instance actually diminishes the ability of the water quality model to simulate the experimentally measured subsurface irradiance reflectance spectrum at this station. This is seen from Figure 37 wherein two calculated optical spectra (for the cross sections of Figs. 2 and 3) are compared with the actually measured optical spectrum. The solid line depicts the predicted optical spectrum for a water mass possessing concentrations of chlorophyll *a*, suspended minerals and dissolved organic carbon close to those actually measured at the station (Chl *a* is taken as 5.0 mg per cubic metre; SM is taken as 5.0 g per cubic metre; DOC is taken as 2.0 g carbon per cubic metre). The dotted line depicts

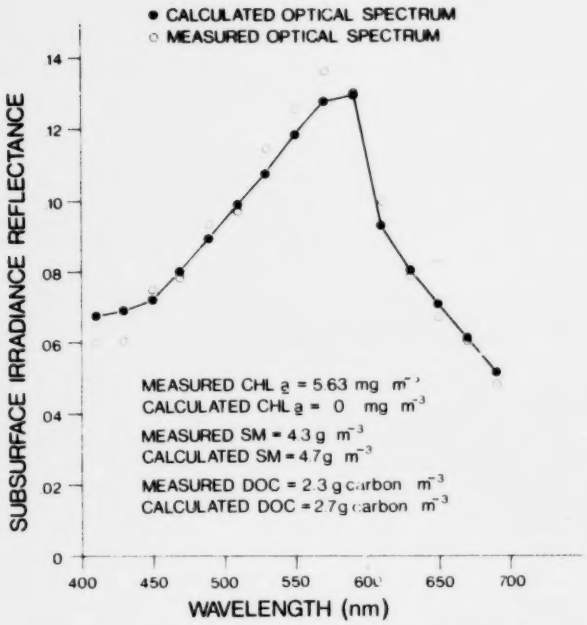

Figure 36. Comparison between the calculated "best fit" and directly measured subsurface irradiance reflectance spectra for a Niagara plume station in western Lake Ontario (using the cross sections of Figs. 2 and 3).

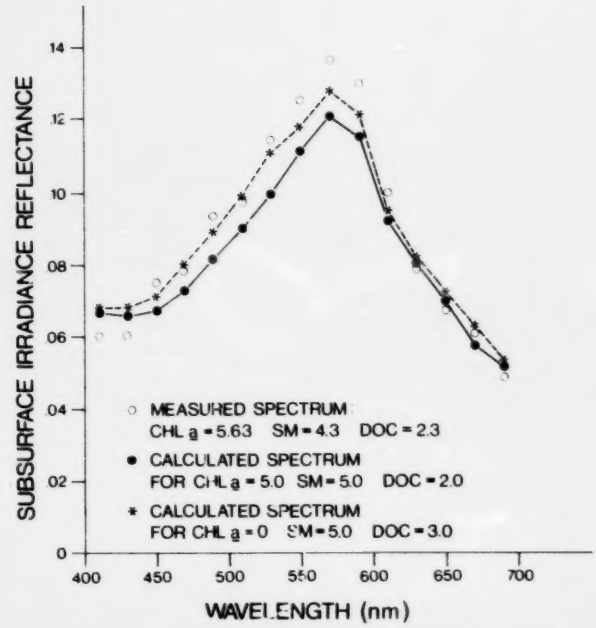

Figure 37. Comparison between the directly measured subsurface irradiance reflectance spectrum of Figure 36 and two calculated subsurface irradiance reflectance spectra (using the cross sections of Figs. 2 and 3 and two sets of water quality parameters).

the predicted optical spectrum for a water mass possessing concentrations of chlorophyll *a*, suspended minerals, and dissolved organic carbon close to those predicted by the Levenberg-Marquardt optimization technique (Chl *a* is taken as zero; SM is taken as 5.0 g per cubic metre; DOC is taken as 3.0 g carbon per cubic metre). A distinct improvement in curve fitting is readily realized by the removal of chlorophyll from the aquatic system.

The general shape of the directly measured subsurface irradiance reflectance spectrum (i.e., a distinct peak in the green wavelength region) shown in Figure 36 is almost always observed in Lake Ontario throughout the field season for both nearshore stations and stations substantially offshore. This is illustrated in Figure 38, wherein directly measured volume reflectance spectra are illustrated for both nearshore and midlake stations visited during May, July and September. Although the actual magnitudes of the observed irradiance reflectance (volume reflectance) may vary (a direct consequence of the spatial and temporal variabilities of the water quality parameters at the stations), the pronounced peak at mid-wavelengths is a readily recognizable feature of each optical spectrum. Salient point (ii) may be

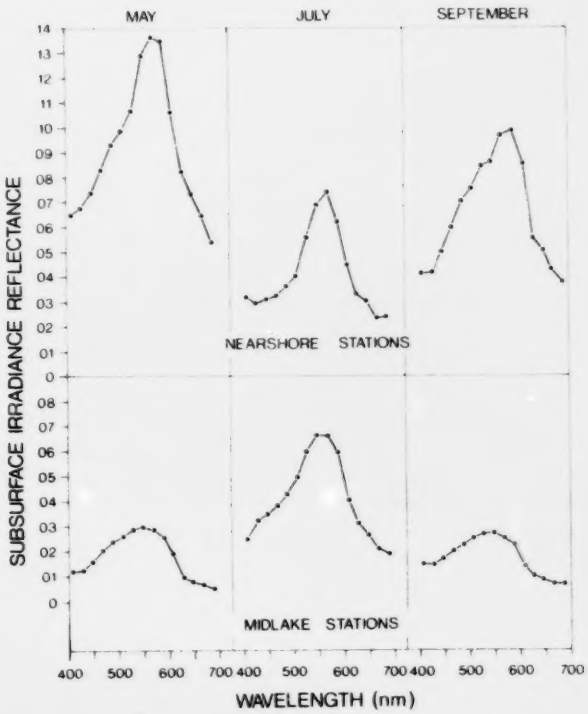

Figure 38. Representative examples of directly measured subsurface irradiance reflectance spectra obtained at nearshore and midlake stations in Lake Ontario throughout the field season.

readily seen from a consideration of Figures 37 and 38 and Figures 18 and 19.

As evident from Figures 18 and 19, the addition of either suspended minerals or chlorophyll *a* (to a water mass containing ~2.0 g carbon per cubic metre) will produce a distinct maximum in the mid-wavelength region of the visible spectrum. Furthermore, as seen from Figures 18 and 19 (and discussed earlier in this report), the effect of the relative concentrations of chlorophyll *a* and suspended minerals normally found in inland lakes will be such as to make the suspended mineral concentrations more effective than the chlorophyll concentrations in generating the "green" maximum in the measured volume reflectance spectrum.

Suggestion (iii) was investigated by using the Levenberg-Marquardt optimization method to obtain a new set of optical cross sections for chlorophyll *a* (uncorrected for phaeophytin contamination). Optical and water quality data collected from the western Lake Ontario test sites during May and July 1979 were utilized. The cross sections for suspended minerals and dissolved organic carbon were retained from Figures 2 and 3, and the optimization technique was used to determine new values of a_{Chl} and b_{Chl} throughout the visible spectrum. For the second data set, however, additional information concerning the composition of the above surface-impinging radiation was also available and therefore utilized. Since the coefficients $r_n(0)$ in Equation 7 are functions of the incident radiance distribution (Gordon *et al.*, 1975) (a direct consequence of the fact that volume reflectance is one of the apparent properties of a water mass), the measured volume reflectance will be influenced by both the solar zenith angle (time of day) and the diffuse fraction of the incident downwelling irradiance. This will be true irrespective of changes in the concentrations of the suspended and dissolved constituents of the water mass (see also discussions in Jerome *et al.*, 1982).

Figure 39 (adapted from Table B.3.2 of Moniteq Ltd., 1981) presents the fraction of the above-water downwelling irradiance that is diffuse for each of the months during which the independent data set was obtained. Figure 39 was then used to generate an appropriate set of $r_n(0)$ coefficients corresponding to each fraction, and these coefficients were inserted into Equation 7 prior to the inverse Levenberg-Marquardt analysis.

The resulting Levenberg-Marquardt analysis yielded b_{Chl} values which were essentially in agreement with the b_{Chl} values obtained previously. The a_{Chl} values obtained, however, were significantly different from the a_{Chl} values previously obtained, as illustrated in Figure 40. Although the two data sets agree reasonably well in the high wavelength red portion, the values of a_{Chl} obtained from the second data set (optimization method) for $\lambda < \sim 600$ nm are consistently about a factor of two lower than the values of a_{Chl} obtained from the first data set (multiple regression method).

Utilizing the Levenberg-Marquardt optimized values of a_{Chl} (b_{Chl} and all other cross-section values as shown in Figs. 2 and 3) and the directly measured subsurface irradiance reflectance spectra, the optimization technique (incorporating the incident radiance distribution dependence of $r_n(0)$) was once again used to estimate the water quality indicators that would generate "best fit" simulations to the observed volume reflectance spectra.

Figure 41 (directly comparable to Fig. 36) illustrates the comparison between the directly measured subsurface irradiance reflectance spectrum (unjoined points) and the calculated "best fit" subsurface irradiance reflectance spectrum (joined points) resulting from the use of the modified values of a_{Chl}. It is seen that the Levenberg-Marquardt optimization technique, in addition to predicting acceptable values for suspended mineral and dissolved organic carbon concentrations for the station, also predicts an acceptable value for chlorophyll concentration.

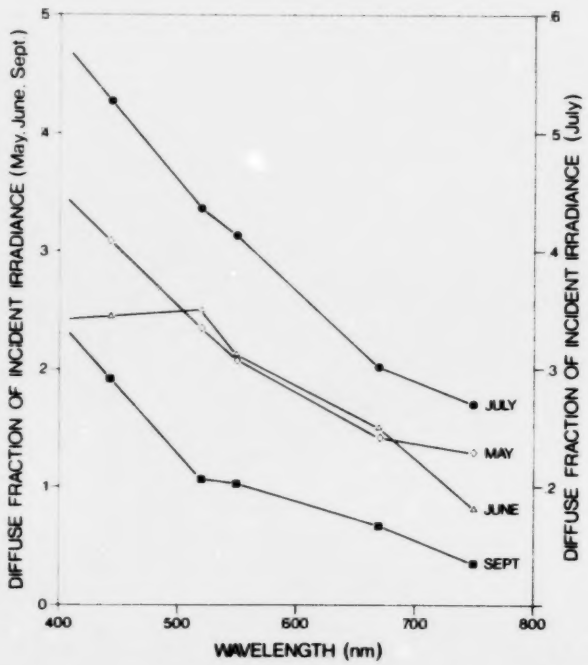

Figure 39. **The wavelength dependence of the diffuse fraction of the above-water downwelling irradiance throughout the field season.**

Figures 42, 43 and 44 illustrate the comparison between the predicted and directly measured concentrations of suspended minerals, dissolved organic carbon, and chlorophyll *a*, respectively. These figures may be directly compared with Figures 33 to 35, the only difference between the two sets of results being that Figures 42 to 44 were generated from the addition of an incident radiance distribution dependence of $r_n(0)$ and the use of the dotted curve (Fig. 40) for the spectral dependence of a_{Chl}.

A consideration of Figures 42 to 44 indicates the following:

(a) The predictive capabilities of the four-component optical model with respect to suspended mineral and dissolved organic carbon concentrations, although impacted to some extent by the use of the modified chlorophyll *a* absorption cross sections, do not appear to be affected to any statistically significant degree.

(b) A very noticeable improvement in the predictive capabilities of the four-component optical model for chlorophyll *a* concentrations, however, is certainly realized by the use of the modified chlorophyll *a* absorption cross sections. Most underpredicted chlorophyll *a* concentrations (Fig. 44) were observed during the month of September. This is more clearly seen from Figure 45, which subdivides the information plotted in Figure 44 into the months (May, July, September) during which the volume reflectance measurements were taken.

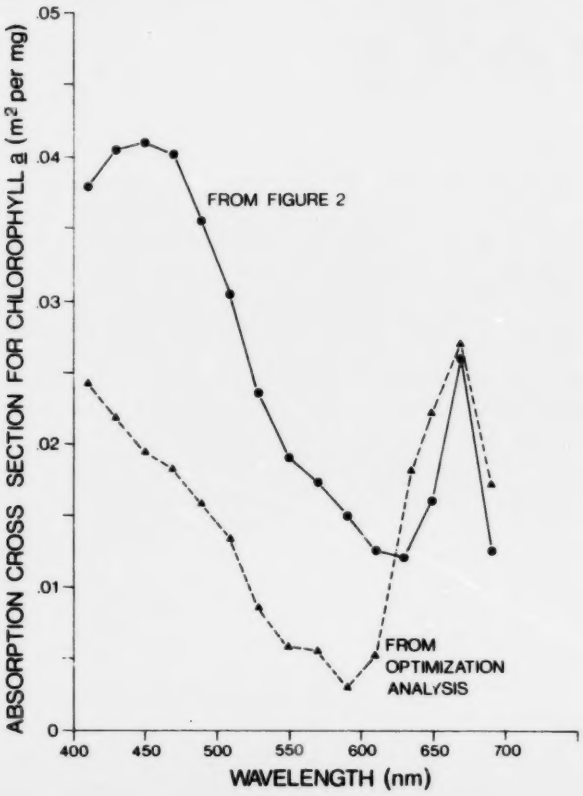

Figure 40. **A comparison of the chlorophyll *a* absorption cross sections obtained from two optical/water quality data sets.**

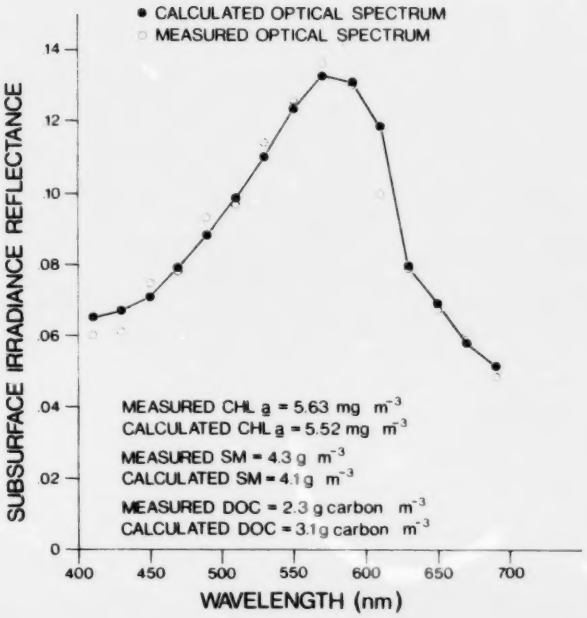

Figure 41. **Comparison between the calculated "best fit" and directly measured subsurface irradiance reflectance spectra for the Niagara plume station of Figure 36 (using the modified chlorophyll *a* absorption cross-section values).**

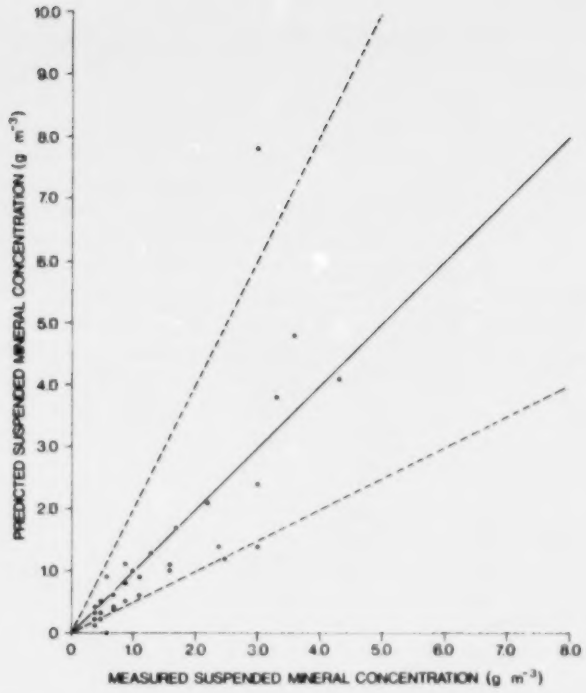

Figure 42. Comparison between predicted and directly measured SM concentrations (using the modified chlorophyll *a* absorption cross sections of Fig. 40).

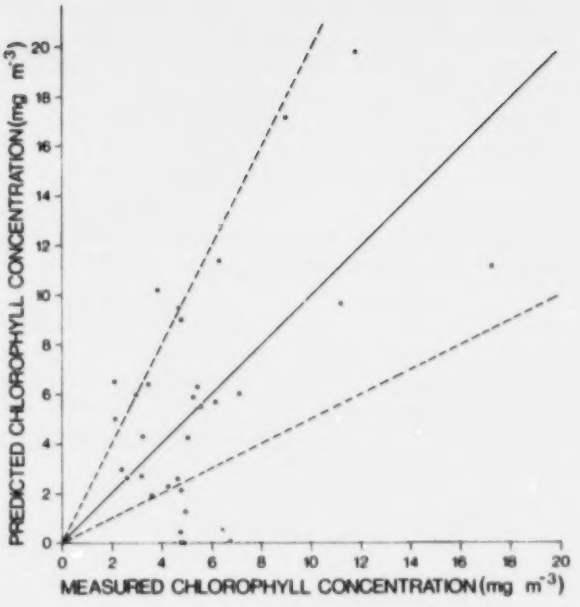

Figure 44. Comparison between predicted and directly measured chlorophyll *a* concentrations (using the modified chlorophyll *a* absorption cross sections of Fig. 40).

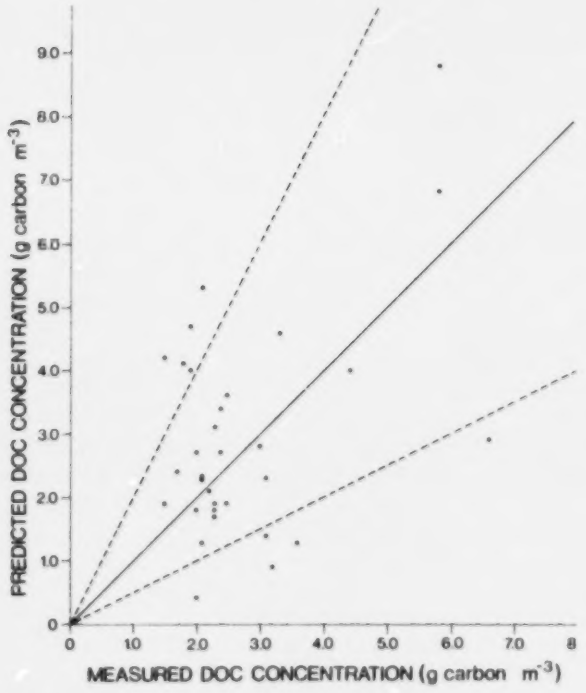

Figure 43. Comparison between predicted and directly measured DOC concentrations (using the modified chlorophyll *a* absorption cross sections of Fig. 40).

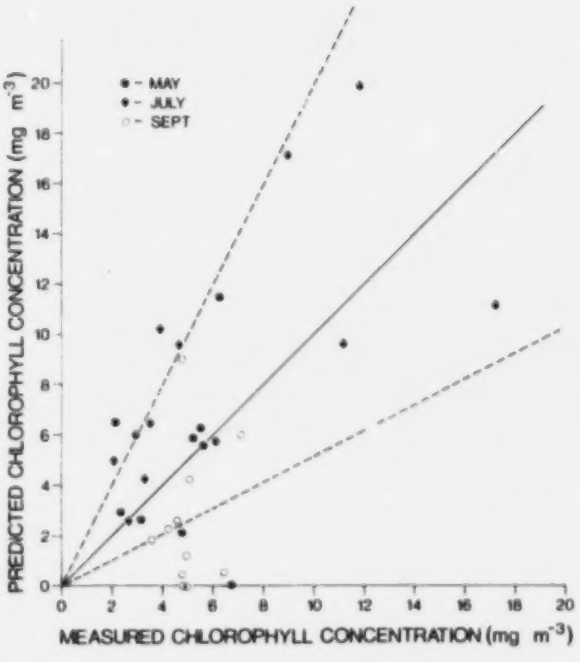

Figure 45. Comparison between predicted and directly measured chlorophyll *a* concentrations (using the modified chlorophyll *a* absorption cross sections of Fig. 40) on a monthly basis.

DIFFICULTIES ASSOCIATED WITH CHLOROPHYLL PREDICTIONS

The physical principles upon which the multi-component optical models described in this report are based, are sound, to within the limitations presented and the current level of aquatic understanding. The absorption and scattering properties of the suspended and dissolved materials comprising inland water masses, along with the properties of the impinging above-surface irradiance, will dictate the subsurface irradiance reflectance (volume reflectance) spectra that will be experimentally measured within those water masses. Water quality indicators (organic and inorganic components of natural water masses) exist as absorption and scattering centres throughout the water column. Thus it logically follows that (within limits of possible ambiguities) simulated volume reflectance spectra generated from known concentrations of water quality indicators could be mathematically compared with measured volume reflectance spectra as a means of estimating the *in situ* concentrations of the water quality indicators that have contributed to the observance of those spectra.

The critical ingredient to such predictive methodology, however, is a precise knowledge of the optical cross sections (absorption and scattering on a per unit concentration basis) of the constituent materials of the water mass in question. While there is an increasing effort, on a worldwide scale, to obtain such precise information, the results of such efforts to date have been far from universally applicable. Certainly, there is general agreement concerning the observed range of such cross-section values and the realization that such cross sections will be not only geographically and subspecies dependent but also temporally dependent. Consequently, a major obstacle to such optical research has been an inherent inability to reproduce experimentally equivalent and/or reliably extrapolatable values for such critical parameters. Our own work in Lake Ontario directly reflects this frustration. Two independent coordinated optical/water quality data sets were obtained in western Lake Ontario during the 1979 field season. Although similar wavelength spectra for the absorption and scattering cross sections of suspended minerals and dissolved organic carbon and for the scattering cross section of chlorophyll appear to be reasonably appropriate for both of the data sets, each of the data sets appears to require significantly dissimilar absorption cross-section spectra for chlorophyll (Fig. 40). Within these cross-section restraints, the four-component optical model possesses a water quality indicator predictability to within a factor of two. The value of such water quality predictability is, of course, a moot point and will not be discussed further here.

This observed uncertainty (i.e., the uncertainty with respect to an appropriate value for a specific species at a specific spatial location and/or temporal location within a biological growth cycle) is currently being observed by many workers. Recently, Morel and Bricaud (1981) have discussed the problems that originate from the inconstancy of the absorption cross section for chlorophyll *a* and have illustrated that large departures from constancy exist not only for several distinct species of chlorophyll-bearing cells but also for variations (cell size, cell structure, cell stability, etc.) within the cells of the same species.

A typical representation of the vast discrepancies that exist among various determinations of a_{Chl} is shown in Figure 46 wherein are plotted not only the apparently conflicting results of the current work but also the results of other workers. Several features are immediately evident from the limited data shown in Figure 46:

(a) There is, in general, reasonable agreement concerning the absorption peak at the red end of the visible spectrum (although our earlier work [Bukata *et al.*, 1981a] along with the work of other investigators concerning the NIMBUS-G satellite bands failed to extract a significant peak at these wavelengths).

(b) Very large departures from constancy are observed at the blue end of the spectrum, as is the existence of a possible absorption peak near 450 nm. Notice that the absorption curve resulting from the first data set in Lake Ontario (curve B) displays a distinct absorption peak in the blue, while the absorption curve resulting from the second data set in Lake Ontario (curve C) does not.

(c) The various curves illustrated in Figure 46 display variable rising and falling slopes. As discussed earlier, such variable slopes may dramatically impact the shape of experimentally measured subsurface irradiance profiles.

(d) The Lake Ontario curve C illustrated in the figure appears to be a lower-limit envelope to the plotted data. This is, in fact, not a valid conclusion, since many other workers (data not shown) have obtained smaller values of a_{Chl} than comprise curve C, just as values of a_{Chl} larger than those comprising curve A' have likewise been observed.

The difficulties encountered in the prediction of chlorophyll *a* from optical measurements and methodologies may be readily appreciated from a consideration of Figure 46. These difficulties notwithstanding, however, the results of this investigation do appear somewhat encouraging. Lake Ontario displays a high degree of optical complexity, and although Lake Ontario may be representative of optically complex waters, it is not necessarily representative

of most inland water masses. A four-component optical model (even with inherent uncertainties in the per unit absorption and scattering properties of the chlorophyll-bearing components) has been shown to possess the capability of predicting to within a factor of two simultaneous concentrations of chlorophyll, suspended minerals, and dissolved organic carbon in Lake Ontario. It is certainly reasonable to conclude that such predictability might be dramatically improved for optically less complex waters.

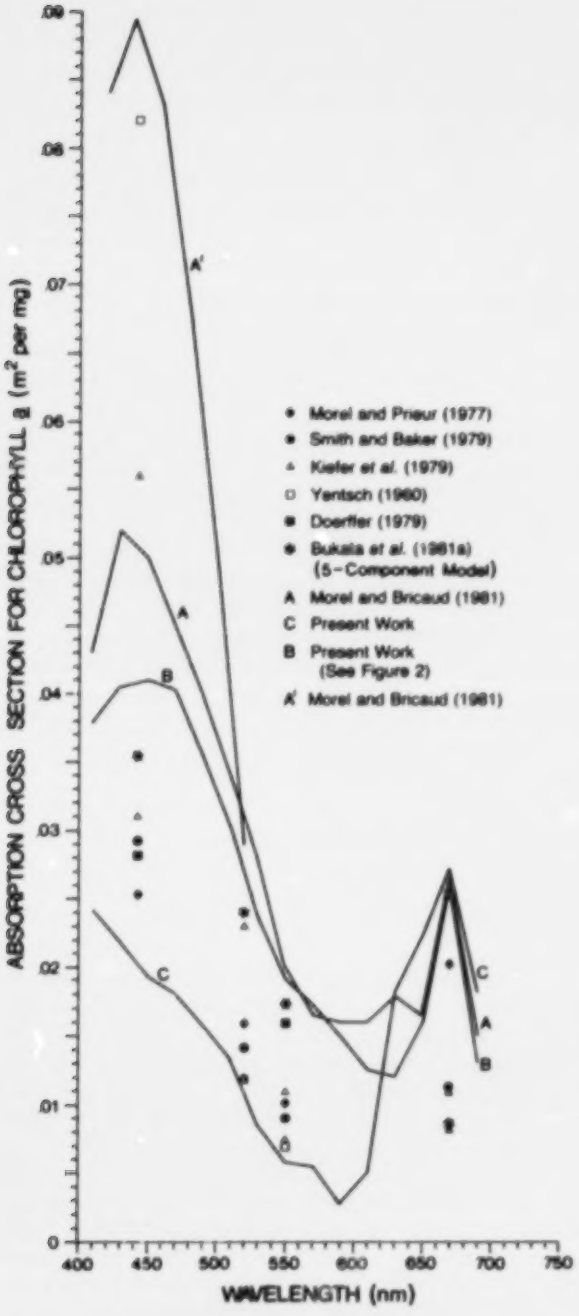

Figure 46. An intercomparison of a number of independent attempts to determine the absorption cross sections of chlorophyll *a*.

REFERENCES

Bukata, R.P., J.H. Jerome, J.E. Bruton and S.C. Jain. 1979. Determination of inherent optical properties of Lake Ontario coastal waters. Appl. Opt. 18: 3926-3932.

Bukata, R.P., J.H. Jerome, J.E. Bruton, S.C. Jain and H.H. Zwick. 1981a. Optical water quality model of Lake Ontario. 1. Determination of the optical cross sections of organic and inorganic particulates in Lake Ontario. Appl. Opt. 20: 1696-1703.

Bukata, R.P., J.E. Bruton, J.H. Jerome, S.C. Jain and H.H. Zwick. 1981b. Optical water quality model of Lake Ontario. 2. Determination of chlorophyll *a* and suspended mineral concentrations of natural waters from submersible and low altitude optical sensors. Appl. Opt. 20: 1704-1714.

Bukata, R.P., J.H. Jerome and J.E. Bruton. 1981c. Validation of a five-component optical model for estimating chlorophyll *a* and suspended mineral concentrations in Lake Ontario. Appl. Opt. 20. 3472-3474.

Burns, N.M. 1980. Canada Centre for Inland Waters (private communication).

Di Toro, D.M. 1978. Optics of turbid estuarine waters: approximations and applications. Water Res. 12: 1059–1068.

Doerffer, V.R. 1979. The distribution of substances in the Elfe Estuary determined by remote sensing. Arch. Hydrobiol. 43: 119-224.

Gordon, H.R., O.B. Brown and M.M. Jacobs. 1975. Computed relationships between the inherent and apparent optical properties of a flat homogeneous ocean. Appl. Opt. 14: 417-427.

Hulburt, E.O. 1945. Optics of distilled and natural water. J. Opt. Soc. Am. 35: 698-705.

IMSL. 1980. The IMSL Library Reference Manual, Edition 8 (revised June 1980), International Mathematical and Statistical Libraries, Inc., Houston.

Jain S.C., H.H. Zwick, W.D. McColl, R.P. Bukata and J.H. Jerome. 1980. Combined Coastal Zone Color Scanner (CZCS), aircraft, and *in situ* water quality remote sensing experiment in Lake Ontario. Proc. Soc. Photo-Op Instrum. Eng. 208: 178-188.

Jerome, J.H., J.E. Bruton and R.P. Bukata. 1982. Influence of scattering phenomena on the solar zenith angle dependence of in-water irradiance levels. Appl. Opt. 21: 642-647.

Kiefer, D.A., R.J. Olson and W.H. Wilson. 1979. Reflectance spectroscopy of marine phytoplankton. Part 1. Optical properties as related to age and growth rate. Limnol. Oceanogr. 24: 664-672.

Levenberg, K. 1944. A method for the solution of certain non-linear problems in least squares. Quant. Appl. Math. 2: 164-168.

Marquardt, D.W. 1963. An algorithm for least-squares estimation of nonlinear parameters. J. SIAM, 11(2).

Moniteq Ltd. 1981. Water quality remote sensing report. Appendices. DSS Contract No. 19SQ.23413-8-1345, Table B.3.2, p. 22.

Morel, A. and A. Bricaud. 1981. Theoretical results concerning light absorption in a discrete medium, and application to specific absorption of phytoplankton. Deep-Sea Res. 11: 1375-1393.

Morel, A. and L. Prieur. 1977. Analysis of variations in ocean color. Limnol. Oceanogr. 22: 709-722.

Smith, R.C. and K.S. Baker. 1979. Optical classification of natural waters. Limnol. Oceanogr. 23: 260-267.

Yentsch, C.S. 1960. The influence of phytoplankton pigments on the color of sea water. Deep-Sea Res. 7: 1-9.

Zwick, H.H., S.C. Jain and R.P. Bukata. 1980. A satellite airborne and *in-situ* water quality experiment in Lake Ontario. Proc. ISPRA Workshop on EURASEP Ocean Color Scanner Exp., pp. 181-198.

APPENDIX

GLOSSARY OF TERMS

Quantity of radiant energy, Q – The quantity of energy transferred by radiation.

Q in joules (J)

Radiant flux, Φ – The rate of flow of radiant energy.

$$\Phi = \frac{Q}{t} \text{ in watts (W)}$$

Radiant intensity, I – The flux radiated from an element of surface per unit solid angle $\partial\omega$.

$$I = \frac{\partial\Phi}{\partial\omega} \text{ in W sr}^{-1}$$

Radiance, L – The radiant flux per unit of solid angle $\partial\omega$ per unit of projected area $\partial A \cos\Theta$, where ∂A is the unit of surface area and Θ is the angle between the incident radiant flux and the normal to the surface area.

$$L = \frac{\partial^2\Phi}{\partial A \cos\Theta \ \partial\omega} \text{ in W m}^{-2} \text{ sr}^{-1}$$

Irradiance, E – The radiant flux per unit of area ∂A.

$$E = \frac{\partial\Phi}{\partial A} \text{ in W m}^{-2}$$

Downwelling irradiance,

$$E_d = \int_{\Phi=0}^{2\pi} \int_{\Theta=0}^{\pi/2} L(\Theta,\Phi) \cos\Theta \ \partial\omega$$

Upwelling irradiance,

$$E_u = \int_{\Phi=0}^{2\pi} \int_{\Theta=\pi/2}^{\pi} L(\Theta,\Phi) \cos\Theta \ \partial\omega$$

where $\Theta = 0$ indicates the downward normal direction.

Absorption coefficient, a – The fraction of radiant energy absorbed from a collimated beam per unit distance ∂x.

$$a = \frac{-(\partial\Phi)_{abs}}{\Phi\partial x} \text{ in m}^{-1}$$

Scattering coefficient, b – The fraction of radiant energy scattered from a collimated beam per unit distance ∂x.

$$b = \frac{-(\partial\Phi)_{scat}}{\Phi\partial x} \text{ in m}^{-1}$$

Total attenuation coefficient, c – The fraction of radiant energy removed from a beam per unit distance ∂x owing to the combined processes of both absorption and scattering.

$$c = -\left[\frac{(\partial\Phi)_{abs} + (\partial\Phi)_{scat}}{\Phi\partial x}\right]$$

$$= a+b \qquad \text{in m}^{-1}$$

Scattering albedo, ω_o – The number of scattering interactions expressed as a fraction of the total number of interactions.

$$\omega_o = \frac{b}{c}$$

Volume scattering function, $\beta(\Theta)$ – The scattered radiant intensity in a direction Θ per unit scattering volume ∂V normalized to the incident irradiance E. Appropriate integrations of $\beta(\Theta)$ provide mathematical definitions of the scattering, forwardscattering and backscattering coefficients.

$$\beta(\Theta) = \frac{\partial I(\Theta)}{E\partial V} \text{ in m}^{-1} \text{ sr}^{-1}$$

Forwardscattering probability, F – The ratio of the scattering into the forward hemisphere (i.e., the hemisphere ahead of the interaction) to the total scattering into all directions.

$$F = \frac{\int_{\Phi=0}^{2\pi} \int_{\Theta=0}^{\pi/2} \beta(\Theta)\partial\omega}{\int_{\Phi=0}^{2\pi} \int_{\Theta=0}^{\pi} \beta(\Theta)\partial\omega}$$

Backscattering probability, B – The ratio of the scattering into the backward hemisphere (i.e., the hemisphere behind the interaction) to the total scattering into all directions.

$$B = \frac{\int_{\Phi=0}^{2\pi} \int_{\Theta=\pi/2}^{\pi} \beta(\Theta)\partial\omega}{\int_{\Phi=0}^{2\pi} \int_{\Theta=0}^{\pi} \beta(\Theta)\partial\omega}$$

Forwardscattering coefficient,

$$Fb = \int_{\Phi=0}^{2\pi} \int_{\Theta=0}^{\pi/2} \beta(\Theta)\partial\omega \quad \text{in } m^{-1}$$

Backscattering coefficient,

$$Bb = \int_{\Phi=0}^{2\pi} \int_{\Theta=\pi/2}^{\pi} \beta(\Theta)\partial\omega \quad \text{in } m^{-1}$$

Scattering coefficient,

$$b = \int_{\Phi=0}^{2\pi} \int_{\Theta=0}^{\pi} \beta(\Theta)\partial\omega \quad \text{in } m^{-1}$$

where $b = Fb + Bb$.

Volume reflectance (irradiance ratio, irradiance reflectance or diffuse reflectance), R – The ratio of the upwelling irradiance to the downwelling irradiance at any point.

$$R = \frac{E_u}{E_d}$$

Irradiance attenuation coefficient, K – The logarithmic depth derivative or the downwelling irradiance at depth z.

$$K(z) = \frac{1}{E_d(z)} \left[\frac{\partial E_d(z)}{\partial z} \right] \text{ in } m^{-1}$$

Scalar irradiance, E_0 – The integral overall directions of the radiance distribution at a point.

$$E_0 = \int_{\Phi=0}^{2\pi} \int_{\Theta=0}^{\pi} L(\Theta,\Phi)\partial\omega \quad \text{in W m}^{-2}$$

Downwelling scalar irradiance, E_{0d}

$$E_{0d} = \int_{\Phi=0}^{2\pi} \int_{\Theta=0}^{\pi/2} L(\Theta,\Phi)\partial\omega \quad \text{in W m}^{-2}$$

Downwelling distribution function, D_d – The ratio of the downwelling scalar irradiance at depth z to the downwelling irradiance at that depth.

$$D_d(z) = \frac{E_{0d}(z)}{E_d(z)}$$

Environnement Canada
Environment Canada

La mesure directe des paramètres optiques au service de l'estimation des indicateurs de la qualité de l'eau des lacs

R.P. Bukata, J.E. Bruton et J.H. Jerome

ÉTUDE N° 140, SÉRIE SCIENTIFIQUE

DIRECTION GÉNÉRALE DES EAUX INTÉRIEURES
INSTITUT NATIONAL DE RECHERCHES SUR LES EAUX
CENTRE CANADIEN DES EAUX INTÉRIEURES
BURLINGTON (ONTARIO) 1985

(Available in English on request)

© Ministre des Approvisionnements et Services Canada 1985
Cat. No. En 36-502/140F
ISBN 0-662-93419-9

Table des matières

	Page
RÉSUMÉ	viii
ABSTRACT	ix
SOMMAIRE	x
THÉORIE À INTRODUCTION	1
LES SECTIONS EFFICACES OPTIQUES DU LAC ONTARIO	4
SPECTRES DU FACTEUR DE RÉFLEXION DE L'ÉCLAIREMENT ÉNERGÉTIQUE DE LA SURFACE SOUS-JACENTE	5
FACTEUR DE RÉFLEXION DE L'ÉCLAIREMENT ÉNERGÉTIQUE DE LA SURFACE SOUS-JACENTE À UNE SEULE LONGUEUR D'ONDE	16
RELATIONS ENTRE LES PARAMÈTRES OPTIQUES ET LES PARAMÈTRES DE LA QUALITÉ DE L'EAU	23
LA TECHNIQUE D'OPTIMISATION À PLUSIEURS VARIABLES	24
L'APPLICATION DU MODÈLE DE LA QUALITÉ DE L'EAU À L'ESTIMATION DES TENEURS EN CHLOROPHYLLE, EN MINÉRAL EN SUSPENSION ET EN CARBONE ORGANIQUE EN SOLUTION DANS LE LAC ONTARIO	26
DIFFICULTÉS PROPRES AUX PRÉVISIONS DE LA CHLOROPHYLLE	32
RÉFÉRENCES	34
ANNEXE. Glossaire	35

Tableau

1.	Spectres des sections efficaces d'absorption et de rétrodiffusion à quinze points utilisés avec les équations 6 et 7 du présent rapport	8

Illustrations

Page

Figure 1. Organigramme des opérations retenues dans le développement de la méthodologie de l'étude optique de la qualité de l'eau de la surface sous-jacente 4

Figure 2. Les sections efficaces d'absorption calculées pour la chlorophylle *a* non corrigée pour la présence de phéophytine pour la teneur totale en minéraux en suspension (MS) et pour du carbone organique en solution (DOC) 5

Figure 3. Les sections efficaces de diffusion calculées pour la chlorophylle *a* non corrigée pour la présence de phéophytine, et pour la teneur totale en MS 5

Figure 4. Spectres des facteurs de réflexion de l'éclairement énergétique de la surface sous-jacente pour diverses teneurs en chlorophylle *a* dans une masse d'eau dont la teneur en MS et la teneur en DOC sont fixées à zéro 9

Figure 5. Spectres des facteurs de réflexion de l'éclairement énergétique de la surface sous-jacente pour diverses teneurs en chlorophylle *a* dans une masse d'eau dont la teneur en DOC est fixée à zéro et dont la teneur totale en MS est fixée à 0.10 g m^{-3} 9

Figure 6. Spectres des facteurs de réflexion de l'éclairement énergétique de la surface sous-jacente pour diverses teneurs en chlorophylle *a* dans une masse d'eau dont la teneur en DOC est fixée à zéro et la teneur totale en MS est fixée à 0.20 g m^{-3} 9

Figure 7. Spectres des facteurs de réflexion de l'éclairement énergétique de la surface sous-jacente pour diverses teneurs en chlorophylle *a* dans une masse d'eau dont la teneur en DOC est fixée à zéro et la teneur totale en MS est fixée à 0.50 g m^{-3} 10

Figure 8. Spectres des facteurs de réflexion de l'éclairement énergétique de la surface sous-jacente pour diverses teneurs en chlorophylle *a* dans une masse d'eau dont la teneur en DOC est fixée à zéro et la teneur totale en MS est fixée à 1.00 g m^{-3} 10

Figure 9. Spectres des facteurs de réflexion de l'éclairement énergétique de la surface sous-jacente pour diverses teneurs en chlorophylle *a* dans une masse d'eau dont la teneur en DOC est fixée à zéro et la teneur totale en MS est fixée à 2.0 g m^{-3} 10

Figure 10. Spectres des facteurs de réflexion de l'éclairement énergétique de la surface sous-jacente pour diverses teneurs en chlorophylle *a* dans une masse d'eau dont la teneur en DOC est fixée à zéro et la teneur totale en MS est fixée à 5.00 g m^{-3} 11

Figure 11. Spectres des facteurs de réflexion de l'éclairement énergétique de la surface sous-jacente pour diverses teneurs en chlorophylle *a* dans une masse d'eau dont la teneur en DOC est fixée à zéro et la teneur totale en MS est fixée à 10.0 g m^{-3} 11

Figure 12. Spectres des facteurs de réflexion de l'éclairement énergétique de la surface sous-jacente pour diverses teneurs en chlorophylle *a* dans une masse d'eau dont la teneur en DOC est fixée à zéro et la teneur totale en MS est fixée à 2.0 g m^{-3} 11

Figure 13. Spectres des facteurs de réflexion de l'éclairement énergétique de la surface sous-jacente pour diverses teneurs en MS dans une masse d'eau renfermant une petite teneur fixe en chlorophylle *a* et une teneur nulle en DOC 12

Illustrations (suite)

Page

Figure 14. Spectres des facteurs de réflexion de l'éclairement énergétique de la surface sous-jacente pour diverses teneurs en MS dans une masse d'eau renfermant une grande teneur fixe en chlorophylle *a* et une teneur nulle en DOC 12

Figure 15. Spectres des facteurs de réflexion de l'éclairement énergétique de la surface sous-jacente pour diverses teneurs en DOC dans une masse d'eau dont la teneur en MS est fixée à 0.05 g m^{-3} et la teneur en chlorophylle *a* est fixée à 1.00 mg m^{-3} 13

Figure 16. Spectres des facteurs de réflexion de l'éclairement énergétique de la surface sous-jacente pour diverses teneurs en DOC dans une masse d'eau contenant une grande teneur fixe en chlorophylle *a* (10.0 mg m^{-3}) et une petite teneur fixe en MS (0.05 g m^{-3}) 13

Figure 17. Spectres des facteurs de réflexion de l'éclairement énergétique de la surface sous-jacente pour diverses teneurs en DOC dans une masse d'eau contenant une petite teneur fixe en chlorophylle *a* (0.05 mg m^{-3}) et une grande teneur fixe en MS (10.0 g m^{-3}) 13

Figure 18. Spectres des facteurs de réflexion de l'éclairement énergétique de la surface sous-jacente pour diverses teneurs en chlorophylle *a* d'une masse d'eau dans laquelle la teneur en DOC est fixée à 2.0 g carbone m^{-3} et la teneur totale en MS est fixée à zéro 14

Figure 19. Spectres des facteurs de réflexion de l'éclairement énergétique de la surface sous-jacente pour diverses teneurs en MS d'une masse d'eau dans laquelle la teneur en DOC est fixée à 2.0 g carbone m^{-3} et la teneur en chlorophylle *a* est fixée à 0.05 mg m^{-3} 14

Figure 20. Spectres des facteurs de réflexion de l'éclairement énergétique de la surface sous-jacente pour diverses teneurs en MS d'une masse d'eau dans laquelle la teneur en DOC est fixée à 2.0 g carbone m^{-3} et la teneur en chlorophylle *a* est fixée à 10.0 mg m^{-3} 14

Figure 21. Spectres des facteurs de réflexion de l'éclairement énergétique de la surface sous-jacente pour diverses teneurs en chlorophylle *a* et en MS d'une masse d'eau dans laquelle la teneur en DOC est fixée à 2.0 g carbone m^{-3} 15

Figure 22. Spectres des facteurs de réflexion de l'éclairement énergétique de la surface sous-jacente pour diverses teneurs en chlorophylle *a* et en MS d'une masse d'eau dans laquelle la teneur en DOC est fixée à 10.0 g. carbone m^{-3} 15

Figure 23. Relations entre les facteurs de réflexion à 450 nm (bleu) et une teneur en chlorophylle *a* d'une masse d'eau dans laquelle la teneur en DOC est fixée à 2.0 g carbone m^{-3} et la teneur en MS varie entre zéro et 20 g m^{-3} 18

Figure 24. Relations entre les facteurs de réflexion à 570 nm (vert) et une teneur en chlorophylle *a* d'une masse d'eau dans laquelle la teneur en DOC est fixée à 2.0 g carbone m^{-3} et la teneur en MS varie entre zéro et 20 g m^{-3} 18

Figure 25. Relations entre les facteurs de réflexion à 650 nm (rouge) et une teneur en chlorophylle *a* d'une masse d'eau dans laquelle la teneur en DOC est fixée à 2.0 g carbone m^{-3} et la teneur en MS varie entre zéro et 10 g m^{-3} 19

Figure 26. Relations entre les facteurs de réflexion à 450 nm (bleu) et la teneur en MS pour plusieurs teneurs discrètes en chlorophylle *a* d'une masse d'eau dans laquelle la teneur en DOC est fixée à 2.0 g carbone m^{-3} 19

Illustrations (suite)

Page

Figure 27. Relations entre les facteurs de réflexion à 450 nm (bleu) et la teneur en MS d'une masse d'eau dans laquelle la teneur en DOC varie entre zéro et 5 g carbone m^{-3} et la teneur en chlorophylle *a* varie entre 0.05 et 20.0 mg m^{-3} 20

Figure 28. Relations entre les facteurs de réflexion à 570 nm (vert) et la teneur en MS pour plusieurs teneurs discrètes en chlorophylle *a* d'une masse d'eau dans laquelle la teneur en DOC est fixée à 2.0 g carbone m^{-3} 20

Figure 29. Relations entre les facteurs de réflexion à 570 nm (vert) et la teneur en MS d'une masse d'eau dans laquelle la teneur en DOC varie entre zéro et 5 g carbone m^{-3} et la teneur en chlorophylle *a* varie entre 0.05 et 20.0 mg m^{-3} 21

Figure 30. Relations entre les facteurs de réflexion à 650 nm (rouge) et la teneur en MS pour plusieurs teneurs discrètes en chlorophylle *a* d'une masse d'eau dans laquelle la teneur en DOC est fixée à 2.0 g carbone m^{-3} 21

Figure 31. Relations entre les facteurs de réflexion à 650 nm (rouge) et la teneur en MS d'une masse d'eau dans laquelle la teneur en DOC varie entre zéro et 5 g carbone m^{-3} et la teneur en chlorophylle *a* varie entre 0.05 et 20.0 mg m^{-3} 22

Figure 32. Relations entre les facteurs de réflexion à 650 nm (rouge) et la teneur en MS d'une masse d'eau dans laquelle la teneur en DOC varie entre zéro et 5 g carbone m^{-3} et la teneur en chlorophylle *a* varie entre 0.05 et 5.0 mg m^{-3} 22

Figure 33. Comparaison entre les teneurs en MS prévues et les teneurs mesurées directement 27

Figure 34. Comparaison entre les teneurs en DOC prévues et celles mesurées directement 27

Figure 35. Comparaison entre les teneurs en chlorophylle *a* prévues et celles mesurées directement 27

Figure 36. Comparaison entre les spectres des facteurs de réflexion de «meilleur ajustement» calculés et ceux mesurés directement pour une station de la péninsule du Niagara de la partie occidentale du lac Ontario 28

Figure 37. Comparaison entre le spectre de la figure 36 mesuré directement et deux spectres calculés 28

Figure 38. Exemples types des spectres des facteurs de réflexion mesurés directement à des stations près des berges et au milieu du lac Ontario durant toute la campagne sur le terrain 29

Figure 39. Variation de la fraction diffuse de l'éclairement énergétique descendant au-dessus de l'eau en fonction de la longueur d'onde durant toute la campagne sur le terrain 29

Figure 40. Comparaison des sections efficaces d'absorption de la chlorophylle *a* pour deux ensembles de données sur la qualité de l'eau et de données optiques. 30

Figure 41. Comparaison entre les spectres des facteurs de réflexion de «meilleur ajustement» calculés et ceux mesurés directement pour la station de la péninsule du Niagara, celle de la figure 36 30

Figure 42. Comparaison entre les teneurs en MS prévues et les teneurs mesurées directement 31

Figure 43. Comparaison entre les teneurs en DOC prévues et les teneurs mesurées directement 31

Illustrations (suite)

Page

Figure 44. Comparaison entre les teneurs en chlorophylle *a* prévues et celles mesurées directement 31

Figure 45. Comparaison entre les teneurs mensuelles prévues de la chlorophylle *a* et les teneurs mesurées directement 31

Figure 46. Intercomparaison d'un certain nombre de tentatives indépendantes de détermination des sections efficaces d'absorption de la chlorophylle *a* 33

Résumé

Le rapport porte sur l'évaluation des mesures directes de paramètres optiques comme moyens d'estimer les indicateurs (concentrations de chlorophylle *a*, de minéraux en suspension et de carbone organique dissous) de la qualité des eaux lacustres. Les analyses et les discussions présentées se fondent sur les résultats d'une étude par voie optique de la qualité des eaux d'un lac complexe (lac Ontario) et portent donc sur le pire cas possible, une masse d'eau telle que le lac Ontario présentant, on le comprendra, une épreuve très sévère d'une telle modélisation optique.

Le rapport n'est pas destiné à servir de cours abrégé sur l'optique lacustre, même si on présente rapidement la théorie mathématique nécessaire, ainsi qu'un vocabulaire des termes techniques utilisés. Les relations fondamentales entre les propriétés optiques mesurées et les indicateurs de qualité de l'eau sont les propriétés spécifiques d'absorption et de dispersion (selon les sections) des divers éléments du milieu aquatique en fonction des longueurs d'ondes observées. On discute longuement, non seulement des techniques utilisées pour estimer ces sections optiques, mais aussi les anomalies présentées par les eaux du lac Ontario (et les eaux sur une échelle plus générale) ainsi que les restrictions que ces anomalies imposent sur la prévision de la qualité de l'eau.

La méthode optique d'estimation de la qualité de l'eau peut être exposée le plus simplement possible comme suit : on obtient, dans la gamme du visible (400 à 700 nm) et par mesure directe, le spectre de la réflectance de l'irradiation sous la surface (réflectance volumique). Les relations données aux diverses longueurs d'ondes par les sections optiques des eaux chargées de chlorophylle, de minéraux en suspension et de carbone organique dissous servent ensuite, avec l'apport des méthodes appropriées d'optimisation, à estimer la concentration de ces paramètres qui produiront le spectre le plus fidèle au spectre observé.

Pour montrer l'effet de la variation des concentrations sur le spectre observé, le rapport donne de nombreux exemples des spectres optiques calculés pour des masses d'eau dont la qualité diffère de façon tranchée.

La mesure à une seule longueur d'onde est à toutes fins utiles rejetée comme moyen d'estimer les indicateurs de qualité d'une eau complexe. Le recours au spectre entier semble toutefois beaucoup plus prometteur. Les anomalies des sections optiques limitent beaucoup les possibilités de la prédiction, mais notre travail a permis d'estimer de façon acceptable les concentrations de minéraux en suspension et de carbone organique dissous dans le lac Ontario. Ce résultat s'avère de bon augure pour l'application d'une telle méthode de prédiction à des eaux continentales optiquement moins complexes. Quant aux possibilités de prédiction fiable des concentrations de la chlorophylle, elles continuent de nous échapper.

La construction et l'utilisation du modèle présenté ne peuvent en aucun cas être considérées comme définitives, étant le portrait fidèle du niveau actuel des connaissances et des techniques de la discipline. Toutefois, des travaux semblables se poursuivent dans de nombreuses autres institutions de recherche qui, dans le monde, s'intéressent aux paramètres optiques.

Abstract

This report contains an evaluation of direct measurements of optical parameters as a means of estimating water quality indicators (concentrations of chlorophyll *a*, suspended minerals, and dissolved organic carbon) that define natural lake waters. The analyses and discussions presented are based on the results of a coordinated optical/water quality study of a complex inland lake (Lake Ontario), and consequently represent a possible "worst case" approach to the problem, since a body of water such as Lake Ontario would understandably present a severe test of such optical modelling.

The report is not intended as a short course in lake optics, although the necessary mathematical theory is briefly presented, as is a glossary of the technical terminology used in the text. The key linkages between measured optical properties and water quality indicators are the specific absorption and scattering properties (cross sections) of the various aquatic components as a function of observed wavelengths. Considerable discussion is presented concerning not only the techniques used to estimate such optical cross sections but also the departures from constancy of such cross sections for Lake Ontario waters (and waters on a more global scale) and the restrictions that such departures from constancy impose upon water quality prediction.

In its most simple form, the method of using optical parameters to estimate water quality considered in this report may be stated as follows: a direct measurement of the subsurface irradiance reflectance (volume reflectance) spectrum is obtained in the 400- to 700-nm (visible) range. Values of the wavelength dependencies of the optical cross sections of chlorophyll, suspended minerals, and dissolved organic carbon are then utilized in conjunction with appropriate optimization methodology to estimate the concentrations of chlorophyll, suspended minerals, and dissolved organic carbon that will generate a subsurface irradiance reflectance spectrum that most closely simulates the directly measured spectrum.

To illustrate the impact on the observed subsurface irradiance reflectance spectrum of varying the concentrations of the three principal organic and inorganic components, the report includes numerous examples of calculated optical spectra for water masses of distinctly dissimilar water quality.

The use of a volume reflectance measurement at a single wavelength as a means of estimating water quality indicators for multi-component waters is all but eliminated by this report. Employing the entire volume reflectance spectrum to estimate water quality indicators, however, appears to be considerably more promising. Despite the severe limitations on predictive capabilities resulting from the inconstancies of the optical cross sections, this work has realized acceptable success in estimating suspended mineral and dissolved organic carbon concentrations in Lake Ontario. This augures well for the use of such predictive methodology in optically less complex inland waters. Reliable predictive capabilities for chlorophyll concentrations continue to be much more elusive.

The model development and application presented here can by no means be regarded as definitive, representing as it does the current level of understanding and state of the art of such aquatic studies. Comparable work, however, is continuing at numerous optically oriented research institutions around the world.

Sommaire

Bien souvent, la couleur de l'eau est considérée comme un indice de qualité. La couleur, qui est souvent chiffrée par mesure de la transparence à l'aide du disque de Secchi, constitue la base des mesures faites par avion et par satellite qui ont été proposées pour évaluer la qualité de l'eau.

Ce rapport examine les propriétés fondamentales de diffusion et d'absorption de l'eau, en fonction de trois indicateurs qui servent souvent à évaluer la qualité, soit la teneur en chlorophylle *a*, en substances minérales en suspension et en carbone organique en solution, et les relie à la réflexion de l'éclairement énergétique par la surface sous-jacente (réflectance volumique). La dépendance de chacun des indicateurs à l'égard de la longueur d'onde est examinée, et est calculée leur influence réciproque sur la réflectance volumique totale.

Selon la théorie, aucune longueur d'onde ou bande de longueurs d'onde n'est, à elle seule, suffisamment sensible pour évaluer la qualité de l'eau à partir de la réflectance volumique. Si on envisage l'analyse globale de tout le spectre visible, il peut être possible de déterminer avec un facteur de deux la teneur en substances minérales en suspension et la teneur en carbone organique en solution. Dans les eaux lacustres, la détermination de la teneur en chlorophylle *a* peut être extrêmement difficile et en présence de teneurs élevées en substances minérales en suspension et/ou en carbone organique en solution, il n'est pas possible de mesuer avec précision la teneur en chlorophylle *a*.

On a comparé expérimentalement des mesures des teneurs en chlorophylle *a*, en substances minérales en suspension et en carbone organique en solution à des mesures de la réflectance volumique faites en même temps dans le lac Ontario en vue de valider le modèle théorique. En général, les résultats concordaient bien, à l'exception de la teneur en chlorophylle *a* qui était généralement inférieure à celle calculée à partir du modèle. Des ajustements empiriques ont permis d'améliorer la concordance, mais ont indiqué que les relations ne sont peut-être pas constantes. Ce problème découle, du moins en partie, des méthodes utilisées pour déterminer la teneur en chlorophylle *a* et de la relation entre la chlorophylle *a* et la biomasse phytoplanctonique.

Le rapport examine en profondeur la théorie de base des mesures optiques et le potentiel de cette dernière comme outil de déduction de la qualité de l'eau à partir de mesures de cette propriété importante qui est la réflectance volumique. Cette théorie peut être appliquée aux observations faites par avion ou par satellite.

La mesure directe des paramètres optiques au service de l'estimation des indicateurs de la qualité de l'eau des lacs

R.P. Bukata, J.E. Bruton et J.H. Jerome

THÉORIE À INTRODUCTION

C'est la coexistence du mécanisme de diffusion et de celui d'absorption qui régit la propagation du rayonnement incident dans une masse d'eau naturelle. La nature et l'ampleur des mécanismes de diffusion et d'absorption dépendent, à leur tour, de la nature et de la teneur en matériaux organiques et inorganiques en suspension et en solution se trouvant dans la colonne d'eau, de même que de la nature et de la répartition de la luminance énergétique du rayonnement incident. Comme la composition des matériaux organiques et inorganiques des masses d'eau varie à la fois dans l'espace et dans le temps, il est logique de déduire que les interactions observées entre ces masses et le champ de rayonnement incident varient suivant la composition. C'est pourquoi les études des propriétés optiques des masses d'eau doivent composer avec deux grandes catégories de propriétés optiques, soit les propriétés *inhérentes* et les propriétés *apparentes*. Les premières sont celles qui sont entièrement indépendantes de la répartition spatiale du rayonnement incident, alors que les secondes sont celles qui dépendent de cette répartition spatiale.

Parmi les propriétés apparentes d'une masse d'eau, mentionnons :

(a) Le facteur de réflexion de l'éclairement énergétique (facteur de réflexion en volume), R

(b) Le coefficient d'atténuation de l'éclairement énergétique, K.

Parmi les propriétés optiques inhérentes d'une masse d'eau mentionnons :

(a) Le coefficient d'atténuation total, c

(b) Le coefficient d'absorption, a

(c) L'albédo de diffusion, ω_0

(d) Le coefficient de diffusion, b

(e) La probabilité de prodiffusion, F

(f) La probabilité de rétrodiffusion, B

(g) La fonction de diffusion en volume, $\beta(\Theta)$.

On a réuni à l'annexe un glossaire donnant une définition technique des termes rencontrés dans ce rapport.

Comme le spectre des fréquences électromagnétiques s'étend des valeurs les plus faibles aux valeurs les plus élevées, et comme la qualité de l'eau est une expression très subjective faisant intervenir une grande variété de substances et de sous-substances organiques et inorganiques, il est impossible dans l'état actuel de nos connaissances de rédiger un document qui traiterait de tous les aspects du rapport entre les mécanismes optiques et la qualité de l'eau. C'est la raison pour laquelle on s'est limité, dans ce travail, aux seules longueurs d'onde visibles du spectre électromagnétique (400 à 700 nm) et à la qualité d'une masse d'eau définie au moyen de ses teneurs en chlorophylle *a*, en minéral en suspension et en carbone organique en solution.

Mathématiquement, les propriétés optiques inhérentes b et B sont définies en fonction des intégrations appropriées de la fonction de diffusion en volume $\beta(\Theta)$. La mesure directe des propriétés optiques inhérentes des eaux naturelles requiert donc l'utilisation d'instruments de mesure élaborés permettant de déterminer la totalité de la fonction de diffusion en volume $\beta(\Theta)$, afin d'isoler le coefficient de diffusion, b, et le coefficient d'absorption, a, du coefficient d'atténuation totale c ($c = a + b$). Par ailleurs, il est beaucoup plus facile d'effectuer des mesures sur place des propriétés optiques apparentes de la colonne d'eau. Le coefficient d'atténuation totale, c, s'obtient directement par transmissométrie, et les propriétés apparentes, R et K, sont déduites directement de mesures spectrométriques ascendantes et descendantes. D'où la préférence accordée dans le vaste domaine de l'optique des océans et des lacs à la détermination des relations générales entre les propriétés optiques inhérentes et apparentes au

moyen de l'élaboration de modèles fondés sur des simulations valables des équations de transfert par rayonnement. Deux modèles de ce genre ont déjà été proposés : le premier par Gordon et coll. (1975), qui fait appel à une simulation de Monte Carlo, et l'autre par Di Toro (1978), qui exploite une combinaison d'approximations exponentielles et d'approximations de diffusion quasi uniques. Même si à l'Institut national de recherches sur les eaux, on a déjà utilisé ces deux simulations de transfert par rayonnement, la suite du présent rapport ne porte que sur la simulation de Gordon et coll. (1975).

Gordon et coll. (1975), déduisent à la suite de l'ajustement d'une courbe par la méthode de Monte Carlo les équations suivantes :

$$\omega_o F = \sum_{n=0}^{N} k'_n(\tau) \left[\frac{K(\tau)}{c(\tau) D_d(\tau)}\right]^n \qquad (1)$$

et

$$\frac{\omega_o B}{1-\omega_o F} = \sum_{n=0}^{N} r'_n(\tau) [R(\tau)]^n \qquad (2)$$

où $\omega_o = \frac{b}{c} \equiv$ albédo de diffusion

$F \equiv$ probabilité de prodiffusion

$B \equiv$ probabilité de rétrodiffusion = 1-F

$K(\tau) \equiv$ coefficient d'atténuation de l'éclairement énergétique à la profondeur τ pour l'éclairement énergétique descendant

$R(\tau) \equiv$ facteur de réflexion de l'éclairement énergétique (facteur de réflexion en volume) à la profondeur τ pour l'éclairement énergétique descendant

$D_d(\tau) \equiv$ fonction de répartition à la profondeur τ de l'éclairement énergétique descendant

$c(\tau) \equiv$ coefficient d'atténuation totale à la profondeur d'eau

$k'_n(\tau)$ et $r'_n(\tau)$ sont les ensembles de coefficients appropriés au développement des équations 1 et 2.

Gordon et coll. (1975) ont déterminé deux ensembles de valeurs pour les coefficients $r'_n(\tau)$ à un convenant aux angles d'incidence solaire $\leq 20°$ et l'autre pour les angles d'incidence solaire $\leq 30°$, angles mesurés dans la colonne d'eau. L'ensemble des coefficients $k'_n(\tau)$ est indépendant de l'angle solaire.

Grâce aux équations 1 et 2 on peut déterminer les propriétés optiques inhérentes ω_o, a, b, F et B à partir des propriétés optiques apparentes $K(\tau)$, $R(\tau)$ et de la propriété optique inhérente $c(\tau)$ (mesurées directement dans le lac). Pour plus de simplicité, on a omis le fait que les équations 1 et 2 dépendent de façon implicite de la longueur d'onde.

Les propriétés inhérentes sont en soi reliées ($c = a + b$), et manifestent des propriétés additives qui dépendent de la présence de centres de diffusion et d'absorption dans la colonne d'eau :

$$a(\lambda) = \sum_{i=1}^{n} x_i a_i(\lambda)$$

$$b(\lambda) = \sum_{i=1}^{n} x_i b_i(\lambda) \qquad (3)$$

$$(Bb)(\lambda) = \sum_{i=1}^{n} x_i (Bb)_i(\lambda)$$

où $(Bb)(\lambda) \equiv$ coefficient de rétrodiffusion à la longueur d'onde λ, le produit de B et b

$x_i \equiv$ concentration de la ith composante de la masse d'eau considérée

$a_i(\lambda) \equiv$ absorption à la longueur d'onde λ d'une concentration unitaire de la composante i

$b_i(\lambda) \equiv$ diffusion à la longueur d'onde λ d'une concentration unitaire de la composante i

$(Bb)_i(\lambda) \equiv$ rétrodiffusion à la longueur d'onde λ d'une concentration unitaire de la composante i.

Du fait que les paramètres $a_i(\lambda)$, $b_i(\lambda)$ et $(Bb)_i(\lambda)$ décrivent le comportement optique, exprimé au moyen de l'absorption et de la diffusion, de la colonne d'eau par concentration unitaire de la matière constitutive, on les désignera dans la suite du texte par l'expression sections

efficaces optiques de la masse d'eau. Comme on le voit, la détermination de ces sections efficaces optiques permet d'établir les liens entre les paramètres optiques inhérents d'une masse d'eau et les paramètres de la qualité de cette eau. Évidemment, le modèle optique définitif doit prendre en considération les sections efficaces de toutes les substances et sous-substances des composantes aquatiques présentes dans les masses d'eau naturelles, de même que les éventuels rapports de temps, de forme et de tailles de chacun. Comme on s'en doute bien, un tel modèle est irréalisable. Dans le présent travail, on retient l'hypothèse qu'à tout instant une masse d'eau naturelle peut être définie comme une combinaison homogène d'eau pure, d'un seul produit organique en suspension (nommément la teneur en chlorophylle *a* corrigée pour la présence de phéophytine), une seule substance inorganique en suspension (représentée par la teneur en minéraux en suspension, MS), une substance organique en solution (représentée par carbone organique en solution DOC) et une substance organique non vivante NLO, établies de la façon suivante :

$$\frac{NLO}{78} = \frac{SO}{78} - \frac{Chl_{cor}}{Chl_{unc}} \cdot \frac{POC}{24} \qquad (4)$$

où SO = valeur mesurée de la teneur totale de la substance organique en suspension

Chl_{unc} = valeur mesurée de la chlorophylle *a* non corrigée pour la présence de phéophytine

Chl_{cor} = valeur mesurée de chlorophylle *a* corrigée pour la présence de phéophytine

POC = valeur mesurée de la teneur en carbone organique particulière.

On a décidé de normaliser les unités de l'équation 4 sur la foi de l'hypothèse (Burns, 1980) que la composante organique moyenne peut être représentée par la formule moléculaire $C_2H_6O_3$ (et par conséquent par un poids moléculaire de 78 unités atomiques). Toutefois l'équation 4 ne tient pas compte de la contribution par la population de zooplancton vivant.

Dans le modèle optique précédent à cinq composantes (MS, Chl *a*, DOC, NLO, eau pure), on peut écrire le système d'équations 3 ainsi

$$a(\lambda) = a_w(\lambda) + x a_{Chl}(\lambda) + y a_{MS}(\lambda) + z a_{DOC}(\lambda) + u\, a_{NLO}(\lambda)$$

$$b(\lambda) = b_w(\lambda) + x\, b_{Chl}(\lambda) + y\, b_{MS}(\lambda) + u\, b_{NLO}(\lambda) \qquad (5)$$

$$(Bb)(\lambda) = (Bb)_w(\lambda) + x(Bb)_{Chl}(\lambda) + y(Bb)_{MS}(\lambda) + u(Bb)_{NLO}(\lambda)$$

où les indices w, Chl, MS, DOC et NLO dénotent, respectivement, l'eau pure, la substance organique, la substance inorganique, la substance organique en solution et la substance organique non vivante de la colonne d'eau. En outre, x, y, z et u dénotent les teneurs en chlorophylle *a* (corrigées pour la présence de phéophytine), en minéraux en suspension, en carbone organique en solution et en substance organique non vivante. Finalement, les composantes de a (a_{Chl}, a_{MS}, a_{DOC}, a_{NLO}), b(b_{Chl}, b_{MS}, b_{NLO}), et Bb[$(Bb)_{Chl}$, $(Bb)_{MS}$, $(Bb)_{NLO}$] correspondent aux sections efficaces optiques.

Il a fallu pour établir les valeurs des sections efficaces, mener un programme coordonné en spectro-optique dans la partie continentale du lac Ontario. Ce programme était en fait une coentreprise regroupant l'INRE (Institut national de recherches sur les eaux), le CCP (Centre canadien de télédétection) et Moniteq Ltd. dans le cadre de laquelle ont eu lieu une télédétection aéroportée et une étude atmosphérique, en plus de l'étude optique théorique *in situ* exposée dans ce rapport. Les détails logistiques de cette expérience en plusieurs étapes réalisée au lac Ontario ont déjà été exposés ailleurs (Jain et coll., [1980]; Zwick et coll.,[1980]; Bukata et coll.,[1981a,b]). Aussi, nous contenterons-nous de mentionner que le prélèvement des échantillons d'eau (qui ont fait l'objet d'analyses en laboratoire afin d'établir les paramètres de la qualité de l'eau) a été effectué concurremment avec les déterminations *in situ*, dans les premiers dix mètres d'eau, des profils de transmission (au moyen d'un transmissomètre multispectral XMS Martek modifié), des profils d'éclairement énergétique spectraux et des facteurs de réflexion en volume spectraux (à l'aide d'un spectromètre balayage Techtum QSM 2500). On trouvera dans Bukata et coll. (1981a) un exposé détaillé des déterminations numériques des sections efficaces optiques. Toutefois, la figure 1 montre un schéma fonctionnel qui donne un aperçu des étapes de base. Les données du transmissomètre *in situ* et du spectromètre ont servi à établir la propriété optique inhérente, $c(\lambda,\tau)$, et les propriétés optiques apparentes, $K(\lambda,\tau)$ et $R(\lambda,\tau)$. Le modèle de Gordon et coll. (1975) (équations 1 et 2) a été exploité (Bukata et coll.,[1979]) comme instrument de détermination des propriétés optiques inhérentes a, b, ω_o, F et B. L'application de techniques de régression multiple aux valeurs trouvées a, b et (Bb) et l'utilisation des paramètres mesurés pour la qualité de l'eau (système d'équations 5) ont permis de trouver les sections efficaces optiques voulues pour le modèle à cinq composantes.

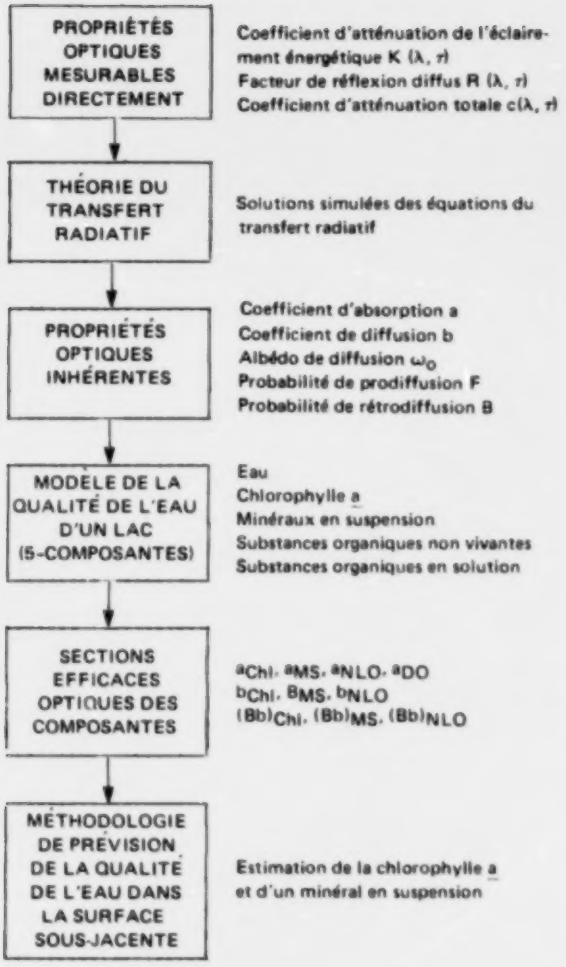

Figure 1. **Organigramme des opérations retenues dans le développement de la méthodologie de l'étude optique de la qualité de l'eau de la surface sous-jacente.**

On s'est aperçu toutefois, au moins pour le lac Ontario, qu'il y avait une légère perte de généralité lorsqu'on utilisait un modèle optique à quatre composantes, c'est-à-dire lorsqu'on négligeait la contribution de la substance NLO. Ceci est en partie attribuable au fait que cette composante a rarement une importance dominante dans le comportement optique du lac Ontario (la teneur chiffrée en NLO [en grammes par mètre cube] dépasse rarement 10 % de la teneur chiffrée en chlorophylle *a* [en milligrammes par mètre cube]). Par ailleurs le fait d'utiliser un modèle à quatre composantes nous a forcés à utiliser une teneur Chl a_{unc} (c'est-à-dire une teneur en chlorophylle *a* non corrigée par la présence de phéophytine). Dans la suite du présent rapport, nous parlerons d'un modèle optique à quatre composantes (eau pure, chlorophylle *a* avec phéophytine, minéraux en suspension et carbone organique en solution). Dans ce modèle, le système d'équations 5 devient :

$$a(\lambda) = a_w(\lambda) + xa_{Chl}(\lambda) = ya_{MS}(\lambda) + za_{DOC}(\lambda)$$

$$b(\lambda) = b_w(\lambda) + xb_{Chl}(\lambda) + yb_{MS}(\lambda) \qquad (6)$$

$$(Bb)(\lambda) = (Bb)_w(\lambda) + x(Bb)_{Chl}(\lambda) + y(Bb)_{MS}(\lambda)$$

où l'indice Chl dénote à présent Chl a_{unc} et x, la teneur Chl a_{unc}.

LES SECTIONS EFFICACES OPTIQUES DU LAC ONTARIO

Les figures 2 et 3 donnent, en fonction d'une longueur d'onde visible, les sections efficaces du modèle optique à quatre composantes (eau pure, MS, Chl a_{unc}, DOC). Plus précisément, la figure 2 donne les valeurs de $a_i(\lambda)$ et la figure 3, les valeurs de $b_i(\lambda)$ pour les eaux du lac Ontario. Par ailleurs, les valeurs $a_w(\lambda)$ et $b_w(\lambda)$ sont tirées du travail de Hulburt (1945). À partir des valeurs connues des sections efficaces optiques, on a pu déterminer un spectre des facteurs de réflexion en volume $R_v(\lambda)$ pour les masses d'eau contenant des quantités différentes de chlorophylle *a* (non corrigée pour la présence de phéophytine), d'un minéral en suspension, d'un carbone organique en solution, en recourant au modèle de simulation Monte Carlo de Gordon et coll. (1975). En principe, toutefois, ces spectres de réflexion mesurés *in situ* peuvent être comparés à un répertoire de spectres des facteurs de réflexion en volume existant pour des masses d'eau contenant des teneurs connues en une seule composante. Ce genre d'intercomparaison est toutefois soumis aux impératifs que voici :

(a) Les eaux naturelles considérées doivent être décrites de façon appropriée par un modèle optique à quatre composantes. De toute évidence, plus une masse d'eau devient complexe du point de vue optique (c'est-à-dire plus il y a de composantes qui modifient de façon importante le comportement optique), moins le modèle considéré sera fiable pour déterminer les indicateurs de la qualité de l'eau du lac.

(b) On doit connaître les sections efficaces optiques. En outre, on doit avoir de bons indices pour supposer qu'elles sont relativement invariantes ou, à tout le moins, négligemment variables durant l'intervalle de mesure. De telles conditions sont remplies à certains endroits et durant certaines périodes, et ne le sont pas à d'autres endroits et

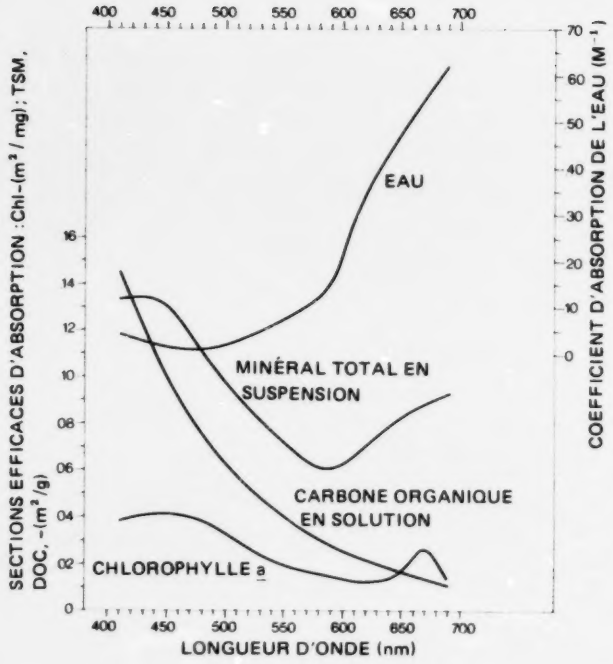

Figure 2. **Les sections efficaces d'absorption calculées pour la chlorophylle *a* non corrigée pour la présence de phéophytine (Chl a_{unc}), pour la teneur totale en minéraux en suspension (MS) et pour du carbone organique en solution (DOC). Sont également illustrés les coefficients d'absorption de l'eau pure.**

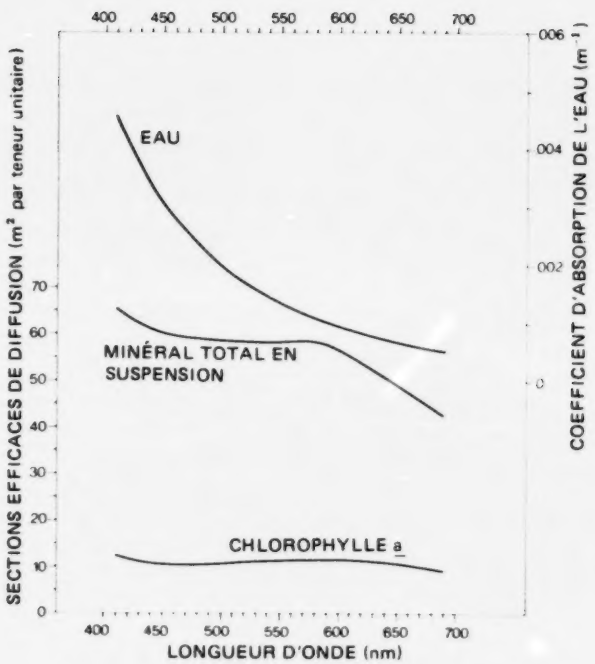

Figure 3. **Les sections efficaces de diffusion calculées pour la chlorophylle *a* non corrigée pour la présence de phéophytine (Chl a_{unc}), pour la teneur totale en (MS). Sont également illustrés les coefficients de diffusion de l'eau pure.**

en d'autres temps. Par exemple, les sections efficaces optiques déterminées dans la partie occidentale du lac Ontario se sont révélées, dans une très large mesure, valides pour la grandeur du lac (Bukata et coll., [1981c]) au cours de la majeure partie de la saison d'études sur le terrain. Toutefois, un travail inédit semble indiquer qu'il y aurait lieu de déterminer un nouvel ensemble de sections efficaces optiques pour les eaux du lac Ontario pour les mois d'automne (sans doute en raison d'un changement des organismes à chlorophylle du biote indigène).

(c) On considère que la masse d'eau est homogène. Le modèle en question ne tient pas compte des effets possibles de stratification.

(d) D'aucune manière, le modèle ne tient compte des impuretés chimiques. De petites concentrations de tels produits chimiques (comparativement aux teneurs en Chl, MS et DOC) produisent des effets d'absorption et de diffusion négligeables, de sorte que leur détection est impossible dans l'état actuel des techniques optiques *in situ*.

SPECTRES DU FACTEUR DE RÉFLEXION DE L'ÉCLAIREMENT ÉNERGÉTIQUE DE LA SURFACE SOUS-JACENTE

Gordon et coll. (1975) nous apprennent que le rapport de réflexion de l'éclairement énergétique (appelé également facteur de réflexion en volume), $R(0,\lambda)$, juste sous la couche de la surface libre est donné par

$$R(0,\lambda) = \sum_{n=0}^{N} r_n(0) \left[\frac{Bb(\lambda)}{a(\lambda) + Bb(\lambda)} \right]^n \qquad (7)$$

où toutes les variables ont les mêmes définitions que précédemment. Dans le présent travail, les $r_n(0)$ sont les coefficients du développement correspondant à celui d'angles d'incidence solaire $<20°$, angles mesurés dans la colonne d'eau. De plus, N est supposé être égal à 3. En exploitant les propriétés additives de $a(\lambda)$ et $Bb(\lambda)$ manifestées par le système d'équations 6 de la représentation à quatre composantes de la masse d'eau, et en recourant aux sections efficaces optiques illustrées aux figures 2 et 3, on voit immédiatement qu'on peut tracer des spectres point

par point des facteurs de réflexion de l'éclairement énergétique de la surface sous-jacente pour des valeurs choisies de x, y et z, c'est-à-dire pour différents types de masses d'eau ayant des teneurs variables en chlorophylle *a* (non corrigées pour la présence de phéophytine), en minéral en suspension et en carbone organique en solution.

La figure 4 nous a fait voir une famille de spectres des facteurs de réflexion (commençant à 410 nm et augmentant par tranche de 20 nm jusqu'à 690 nm), calculés de la façon précitée pour différentes teneurs en chlorophylle *a* dans une masse d'eau où la teneur du minéral en suspension et la teneur du carbone organique en solution sont nulles (c'est-à-dire les spectres d'un modèle de masse d'eau à deux composantes, chlorophylle et eau pure). Comme on le voit bien, les masses d'eau ayant une faible concentration de chlorophylle *a* manifestent un facteur de réflexion en volume important dans la région bleue du spectre, et un facteur de réflexion en volume minimal dans la partie rouge. L'augmentation de la teneur en chlorophylle dans l'eau (évidemment dans une masse d'eau formée seulement d'eau pure et de chlorophylle) tend à diminuer le facteur de réflexion en volume des longueurs d'onde du bleu tout en augmentant, à un rythme plus rapide, le facteur de réflexion en volume des longueurs d'onde du rouge. Pour les teneurs en chlorophylle plus grandes que ~1 à 2 mg m^{-3}, les spectres des facteurs de réflexion de l'éclairement énergétique sont caractérisés par un minimum dans le bleu bien défini et un maximum dans le vert. Une remarque importante s'impose relativement au rôle central joué par la longueur d'onde 505 nm. Comme on le voit bien pour une eau pure ne contenant que de la chlorophylle, le facteur de réflexion en volume est indépendant à 505 nm de la teneur en chlorophylle, c'est-à-dire $\frac{\partial R(0.505)}{\partial \text{ Chl}} = 0$. En intégrant l'équation 7 par rapport à la teneur en chlorophylle, on peut montrer que le facteur de réflexion en volume est indépendant de la teneur en chlorophylle pour cette valeur de λ pour laquelle $\frac{Bb_{Chl}}{a_{Chl}} = \frac{Bb_w}{a_w}$, c'est-à-dire pour cette valeur de λ qui rend le rapport de la rétrodiffusion à l'absorption de la chlorophylle égal au rapport de la rétrodiffusion à l'absorption de l'eau pure. Il s'établit ainsi un équilibre entre les propriétés optiques de chacune des deux composantes de l'eau.

L'introduction d'une petite concentration fixe de minéraux en suspension (0.10 g m^{-3}) dans la masse d'eau (qui devient ainsi un module à trois composantes) donne lieu à la famille de spectres des facteurs de réflexion de l'éclairement énergétique à la surface sous-jacente montrée à la figure 5. Dans une masse d'eau de ce genre (0.10 g m^{-3} MS, zéro DOC), le rythme de diminution du facteur de réflexion en volume dans la région du bleu, causé par l'addition de chlorophylle est presque le même que le rythme d'élévation des facteurs de réflexion en volume dans la région du rouge. La longueur d'onde centrale où $\frac{\partial R(0,\lambda)}{\partial \text{ Chl}} = 0$ représente maintenant ~570 nm. Pour une masse d'eau à trois composantes (eau pure, chlorophylle et minéraux en suspension), le facteur de réflexion en volume est indépendant de la teneur en chlorophylle à la longueur d'onde où $\frac{Bb_{Chl}}{a_{Chl}} = \frac{Bb_w + Bb_{MS}\, C_{MS}}{a_w + a_{MS}\, C_{MS}}$.

Il s'établit donc un équilibre entre les propriétés optiques de la chlorophylle et les propriétés optiques combinées des deux autres composantes de l'eau.

Les figures 6 à 12 représentent, tout comme les figures précédentes, des familles de spectres des facteurs de réflexion de l'éclairement énergétique à la surface sous-jacente pour différentes teneurs en chlorophylle, pour une teneur nulle en DOC et des teneurs fixes en minéral en suspension de 0.2, 0.5, 1.0, 2.0, 5.0, 10.0 et 20.0 g m^{-3}, respectivement. Remarquez que la longueur d'onde centrale où $\frac{\partial R(0,\lambda)}{\partial \text{ Chl}} = 0$ dépasse rapidement 690 nm à mesure que croît la teneur du minéral en suspension.

Les figures 4 à 12 mettent bien en évidence les importantes répercussions sur le spectre des facteurs de réflexion de l'augmentation des teneurs en minéral en suspension dans un lac renfermant de la chlorophylle, alors que la figure 13 fait voir l'évolution de ces spectres par suite d'une augmentation systématique de la teneur en minéral en suspension dans un lac n'ayant aucun carbone organique et une petite quantité fixe de chlorophylle. Par ailleurs, la figure 14 nous fait voir l'effet de cette même variation dans un lac n'ayant aucun carbone organique mais une quantité importante et fixe de chlorophylle. Comme il est logique de s'y attendre, les fortes teneurs de minéraux en suspension (mettons supérieures à ~0.5 g m^{-3}) diminuent de manière draconienne la sensibilité spectrale des facteurs de réflexion en volume par rapport aux changements de la teneur en chlorophylle.

À la lumière de ces résultats, il est évident qu'une large gamme de spectres des facteurs de réflexion peut être pronostiquée pour un modèle à trois composantes (eau pure, chlorophylle, minéraux en suspension) d'une masse d'eau. L'ajout d'une quatrième composante (DOC) au modèle du lac modifiera dans de grandes proportions le spectre des facteurs de réflexion observé juste sous l'inter-

face air-eau, particulièrement dans la partie inférieure des longueurs d'onde du visible (figure 2). La figure 15 nous fait voir directement l'effet de cette modification sur la famille des spectres des facteurs de réflexion en volume (pour des teneurs en DOC variables), dans le cas d'une masse d'eau contenant une faible teneur fixe en minéral en suspension de 0.05 g m^{-3} et une teneur fixe en chlorophylle *a* de 1.00 mg m^{-3}. Il est évident que pour les eaux relativement claires (caractérisées par de petites teneurs en minéral en suspension et des teneurs en chlorophylle petites ou moyennes), l'ajout systématique de carbone organique en solution donne lieu à une diminution rapide des facteurs de réflexion de l'éclairement énergétique dans la surface sous-jacente, aux longueurs d'onde inférieures à ~ 600 nm (c'est-à-dire dans les régions bleue et verte du spectre visible), et une diminution beaucoup plus faible par rapport à la diminution précédente de ces facteurs de réflexion correspondant aux longueurs d'onde supérieures à ~ 600 nm (c'est-à-dire dans la région rouge du spectre visible).

Par ailleurs, la figure 16 montre la répercussion du DOC d'une masse d'eau ayant une grande teneur en Chl *a* (10.0 mg m^{-3}) et une petite teneur fixe en minéraux en suspension (0.05 g m^{-3}). Pour sa part, la figure 17 nous fait voir la répercussion du DOC d'une masse d'eau ayant une petite teneur fixe en Chl *a* (0.05 mg m^{-3}) et une grande teneur fixe en minéraux en suspension (10.0 g m^{-3}). Pour les masses d'eau décrites aux figures 16 et 17, on remarque immédiatement que

(a) La masse d'eau contenant de fortes teneurs en minéraux en suspension connaît des spectres des facteurs de réflexion en volume qui sont dix fois supérieurs à ceux de la masse d'eau contenant de fortes teneurs en chlorophylle.

(b) L'effet du DOC est plus remarquable dans les masses renfermant de fortes teneurs en chlorophylle et une faible teneur en minéraux en suspension que dans celles contenant une faible teneur en chlorophylle et une forte teneur en minéral en suspension.

(c) Pour toutes les masses d'eau, l'effet maximal du DOC est enregistré dans le domaine des faibles longueurs d'onde (bleu) du spectre visible, tandis que l'effet minimal de la même substance est enregistré dans le domaine des hautes longueurs d'onde (rouge) du spectre visible.

Même si à l'échelle de l'aquasystème intérieur le carbone organique en solution varie dans l'espace et dans le temps, on a observé (Bukata et coll., 1981a) qu'une teneur type pas déraisonnable pour le carbone organique en solution dans les Grands lacs est d'environ ~2.0 g carbone m^{-3}.

Les figures 18 et 19 font voir les changements qu'il est possible de prévoir dans les spectres des facteurs de réflexion de l'éclairement énergétique de la surface sous-jacente par suite de modifications, respectivement, des teneurs en chlorophylle et en minéral en suspension dans un lac caractérisé par une teneur fixe en DOC de 2.0 g carbone m^{-3}. Plus précisément, la figure 18 nous fait voir une famille de spectres des facteurs de réflexion en volume qui résulte de la variation de la teneur en chlorophylle d'une masse d'eau ne renfermant aucun minéral en suspension, et la figure 19 présente une famille de spectres des facteurs de réflexion en volume résultant de la variation de la teneur en minéraux en suspension dans une masse d'eau ne contenant pratiquement aucune chlorophylle (une teneur fixe très faible de 0.05 mg m^{-3}).

Certaines similitudes entre les figures 18 et 19 sautent aux yeux. Ainsi, l'augmentation de la teneur en minéraux en suspension ou en chlorophylle d'une masse d'eau renfermant 2.0 g carbone m^{-3} de DOC se traduit par une augmentation plus rapide du facteur de réflexion en volume dans l'extrémité rouge du spectre que dans l'extrémité bleue, de sorte que la forme de base du spectre de la chlorophylle en l'absence de minéraux en suspension se rapproche très fortement de la forme de base du spectre de minéraux en suspension en l'absence de chlorophylle. On voit donc immédiatement que les fortes teneurs en minéraux en suspension donnent lieu à des facteurs de réflexion en volume dix fois supérieurs à ceux résultant de fortes teneurs en chlorophylle. Également, de petites teneurs en minéraux en suspension donnent lieu à des facteurs de réflexion en volume dix fois plus grands que ceux résultant des petites teneurs en chlorophylle. En revanche, les figures 18 et 19 nous apprennent que pour les masses d'eau naturelles renfermant 2.0 g carbone m^{-3} de DOC, les facteurs de réflexion en volume sont comparables dans le cas des masses d'eau renfermant de fortes teneurs en chlorophylle (sans minéraux en suspension) et celui des masses d'eau renfermant des teneurs en minéraux en suspension relativement petites (sans chlorophylle).

On peut voir à la figure 20 la modification que subissent les spectres observés des facteurs de réflexion de l'éclairement énergétique de la surface sous-jacente lorsqu'on augmente la teneur en minéral en suspension dans un lac renfermant une teneur fixe en DOC de 2.0 g carbone m^{-3}, et une forte teneur fixe en chlorophylle *a* de 10.0 mg m^{-3}.

Pour sa part la figure 21 cherche à illustrer les effets interactifs sur les spectres des facteurs de réflexion en volume qui découlent de la variation à la fois de la chlorophylle et des teneurs en minéraux en suspension dans un lac renfermant 2.0 g carbone m^{-3} de DOC. Par ailleurs,

la figure 22 illustre la même chose mais pour un lac renfermant 10.0 g carbone m^{-3} de DOC.

On voit donc immédiatement que les spectres des facteurs de réflexion donnés en exemple dans la présente section servent à illustrer la répercussion qu'auront les variations des paramètres de la qualité de l'eau (chlorophylle, minéraux en suspension, du carbone organique en solution) sur les mesures *in situ* des spectres optiques de ce genre, et servent, de ce fait, à souligner les précautions qu'il faut prendre dans la déconvolution des groupements optiques complexes quand les spectres des facteurs de réflexion en volume sont utilisés pour estimer les paramètres de la qualité de l'eau.

Au surplus, comme on s'en doute bien, les spectres donnés en exemple ici sont incomplets et ne prétendent en aucune manière couvrir la grande diversité de spectres possibles pour des lacs aussi complexes que le lac Ontario. D'où la décision ici d'utiliser des spectres de sections efficaces d'absorption et de rétrodiffusion à 15 points (allant de 410 à 690 nm par tranche de 20 nm), dont les valeurs numériques sont données au tableau 1. Le lecteur qui le désire peut utiliser directement les chiffres du tableau 1 et les introduire dans les équations 6 et 7 afin d'obtenir pour la masse d'eau voulue le facteur de réflexion en volume prévu pour l'éclairement énergétique de la surface sous-jacente.

Tableau 1. Spectres des sections efficaces d'absorption et de rétrodiffusion à 15 points utilisés en rapport avec les équations 6 et 7 du présent rapport

Longueur d'onde (nm)	a_w	a^1_{Chl}	a^2_{Chl}	a_{MS}	a_{DOC}	$(Bb)_w$	$(Bb)_{Chl}$	$(Bb)_{MS}$
410	0.038 00	0.037 80	0.024 28	0.133 50	0.145 00	0.002 29	0.001 36	0.052 40
430	0.026 00	0.040 50	0.021 88	0.135 10	0.121 00	0.001 86	0.001 25	0.049 92
450	0.017 00	0.041 00	0.019 38	0.130 90	0.100 00	0.001 52	0.001 19	0.048 16
470	0.017 00	0.040 20	0.018 17	0.116 80	0.082 90	0.001 28	0.001 16	0.047 60
490	0.021 00	0.035 50	0.015 86	0.103 40	0.068 80	0.001 08	0.001 17	0.047 36
510	0.026 00	0.030 40	0.013 41	0.092 20	0.057 00	0.000 91	0.001 20	0.047 12
530	0.030 00	0.023 60	0.008 55	0.083 40	0.048 00	0.000 77	0.001 25	0.046 80
550	0.037 00	0.019 00	0.005 84	0.073 70	0.040 10	0.000 66	0.001 28	0.046 88
570	0.057 00	0.017 30	0.005 50	0.063 80	0.033 30	0.000 58	0.001 27	0.046 96
590	0.112 00	0.015 00	0.002 96	0.061 10	0.027 90	0.000 50	0.001 24	0.046 16
610	0.236 00	0.012 50	0.005 18	0.067 40	0.023 40	0.000 44	0.001 25	0.044 08
630	0.274 00	0.012 00	0.018 14	0.076 60	0.019 50	0.000 38	0.001 22	0.041 60
650	0.303 00	0.016 00	0.022 31	0.083 50	0.016 20	0.000 33	0.001 16	0.039 20
670	0.370 00	0.026 00	0.027 21	0.087 30	0.015 20	0.000 30	0.001 09	0.036 80
690	0.463 00	0.013 00	0.017 16	0.092 70	0.010 50	0.000 26	0.000 99	0.034 08

a^1_{Chl} = La section efficace d'absorption de la chlorophylle représentée par la courbe B de la figure 46.
a^2_{Chl} = La section efficace d'absorption de la chlorophylle représentée par la courbe C de la figure 46.

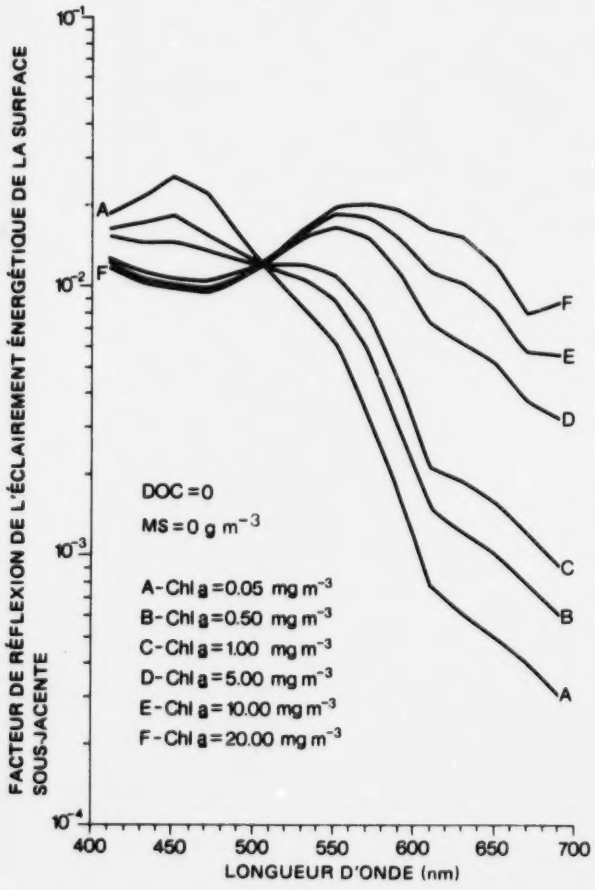

Figure 4. **Spectres des facteurs de réflexion de l'éclairement énergétique de la surface sous-jacente pour diverses teneurs en chlorophylle *a* dans une masse d'eau dont la teneur en MS et la teneur en DOC sont fixées à zéro.**

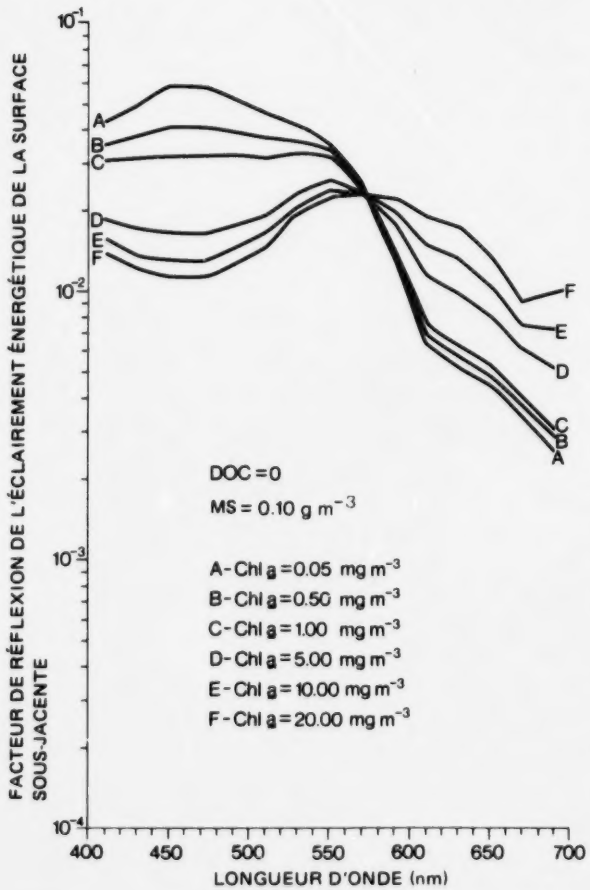

Figure 5. **Spectres des facteurs de réflexion de l'éclairement énergétique de la surface sous-jacente pour diverses teneurs en chlorophylle *a* dans une masse d'eau dont la teneur en DOC est fixée à zéro et dont la teneur totale en MS est fixée à 0.10 g m^{-3}.**

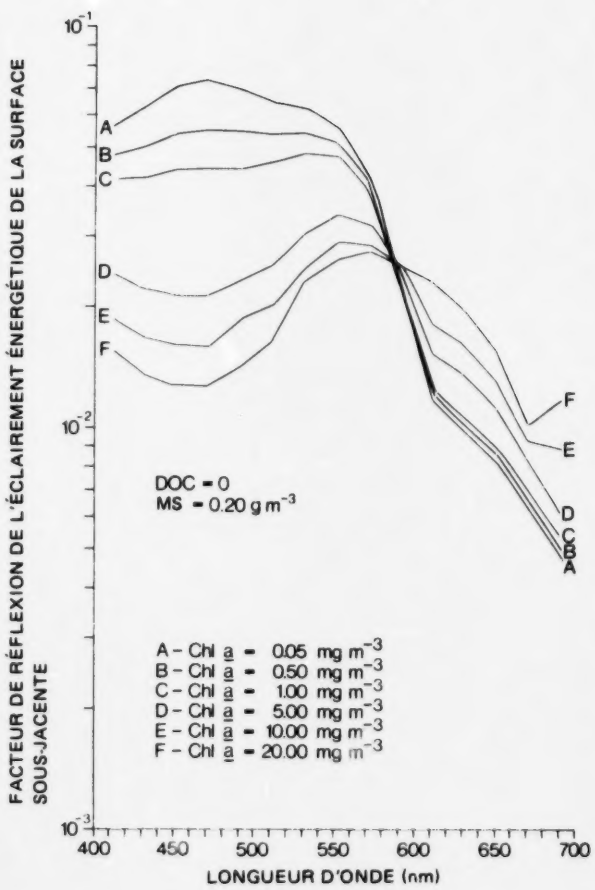

Figure 6. **Spectres des facteurs de réflexion de l'éclairement énergétique de la surface sous-jacente pour diverses teneurs en chlorophylle *a* dans une masse d'eau dont la teneur en DOC est fixée à zéro et la teneur totale en MS est fixée à 0.20 g m^{-3}.**

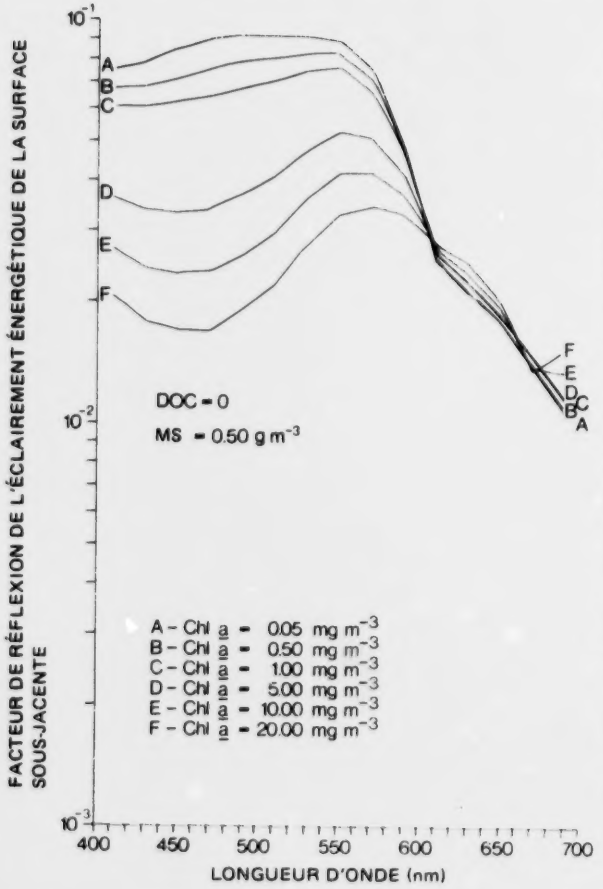

Figure 7. Spectres des facteurs de réflexion de l'éclairement énergétique de la surface sous-jacente pour diverses teneurs en chlorophylle *a* dans une masse d'eau dont la teneur en DOC est fixée à zéro et la teneur totale en MS est fixée à 0.50 g m^{-3}.

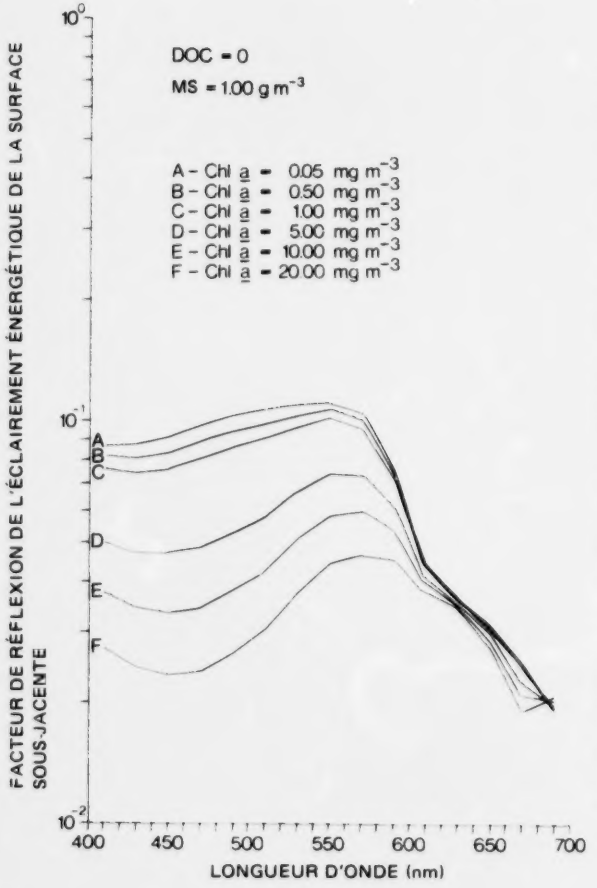

Figure 8. Spectres des facteurs de réflexion de l'éclairement énergétique de la surface sous-jacente pour diverses teneurs en chlorophylle *a* dans une masse d'eau dont la teneur en DOC est fixée à zéro et la teneur totale en MS est fixée à 1.00 g m^{-3}.

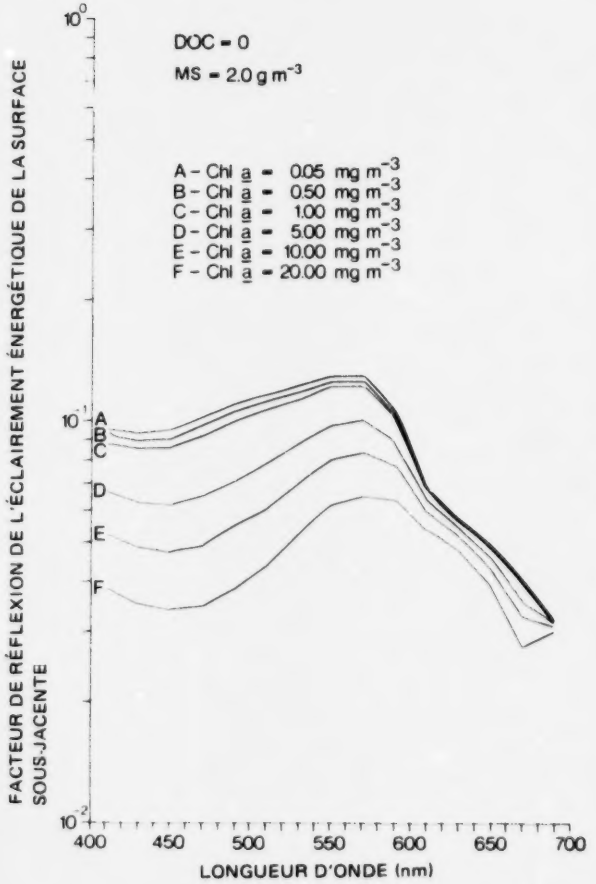

Figure 9. Spectres des facteurs de réflexion de l'éclairement énergétique de la surface sous-jacente pour diverses teneurs en chlorophylle *a* dans une masse d'eau dont la teneur en DOC est fixée à zéro et la teneur totale en MS est fixée à 2.0 g m^{-3}.

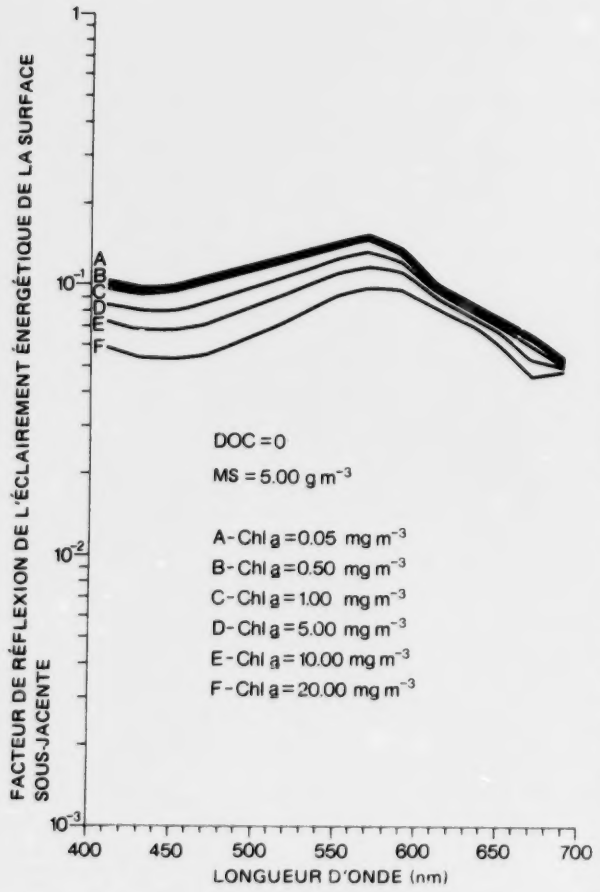

Figure 10. Spectres des facteurs de réflexion de l'éclairement énergétique de la surface sous-jacente pour diverses teneurs en chlorophylle *a* dans une masse d'eau dont la teneur en DOC est fixée à zéro et la teneur totale en MS est fixée à 5.00 g m^{-3}.

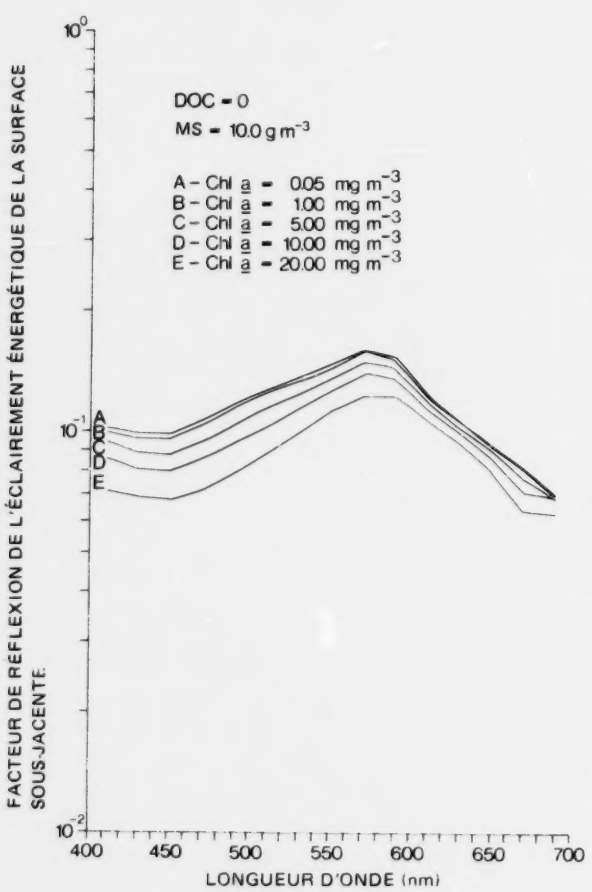

Figure 11. Spectres des facteurs de réflexion de l'éclairement énergétique de la surface sous-jacente pour diverses teneurs en chlorophylle *a* dans une masse d'eau dont la teneur en DOC est fixée à zéro et la teneur totale en MS est fixée à 10.0 g m^{-3}.

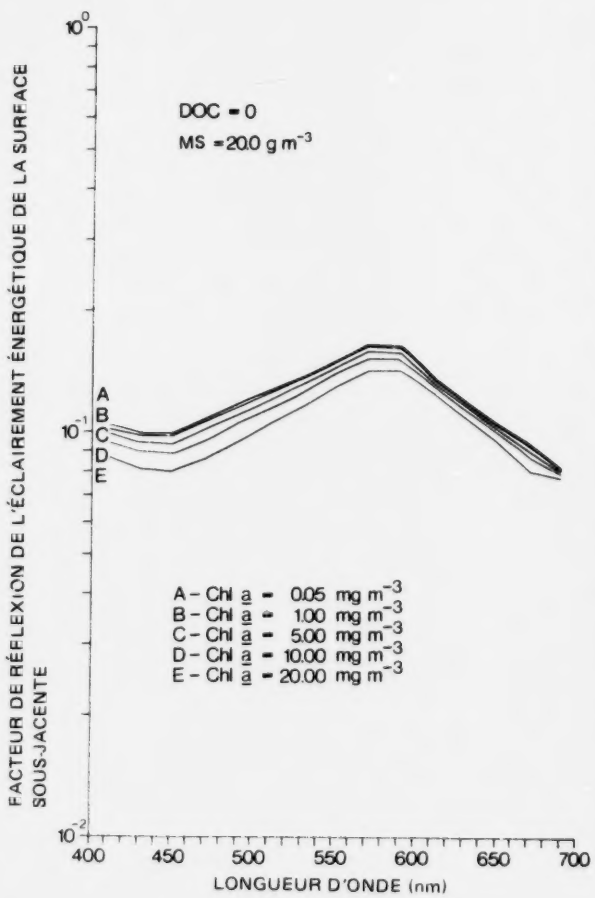

Figure 12. Spectres des facteurs de réflexion de l'éclairement énergétique de la surface sous-jacente pour diverses teneurs en chlorophylle *a* dans une masse d'eau dont la teneur en DOC est fixée à zéro et la teneur totale en MS est fixée à 20.0 g m^{-3}.

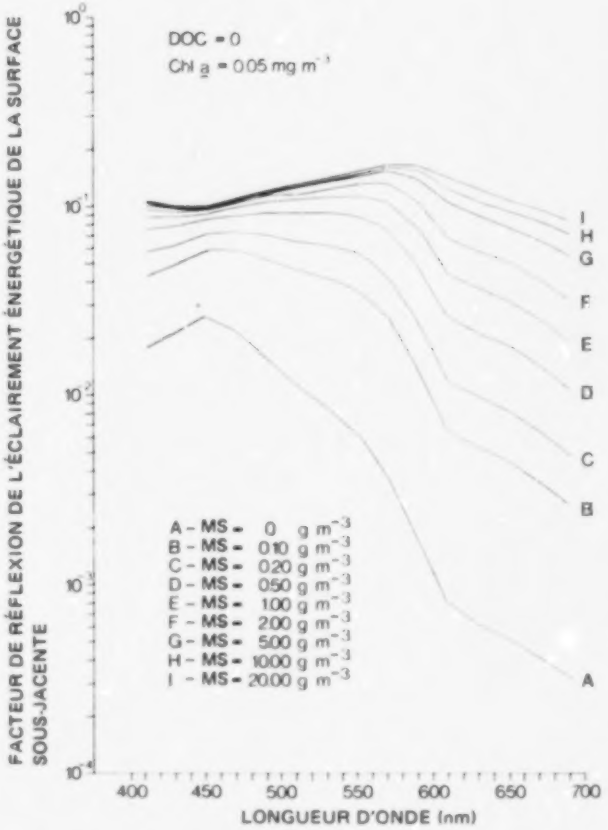

Figure 13. **Spectres des facteurs de réflexion de l'éclairement énergétique de la surface sous-jacente pour diverses teneurs en MS dans une masse d'eau renfermant une petite teneur fixe en chlorophylle *a* et une teneur nulle en DOC.**

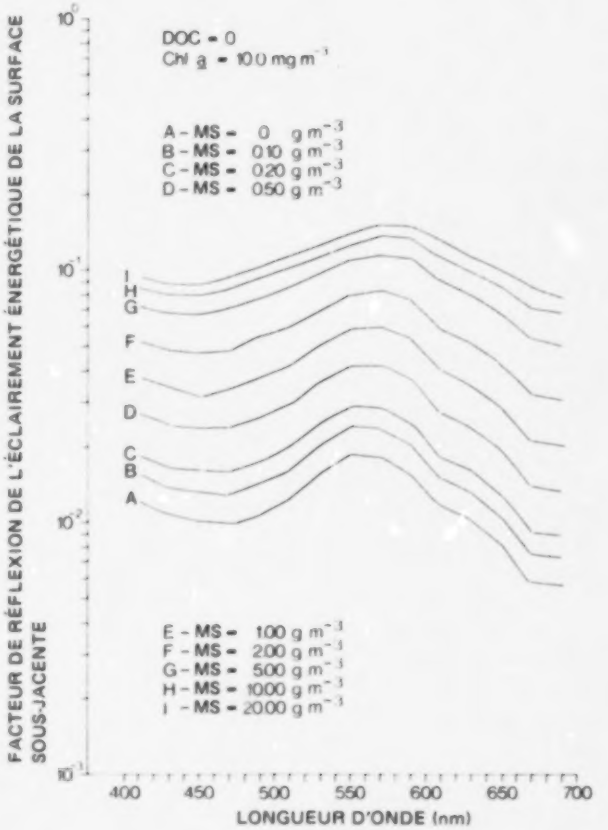

Figure 14. **Spectres des facteurs de réflexion de l'éclairement énergétique de la surface sous-jacente pour diverses teneurs en MS dans une masse d'eau renfermant une grande teneur fixe en chlorophylle *a* et une teneur nulle en DOC.**

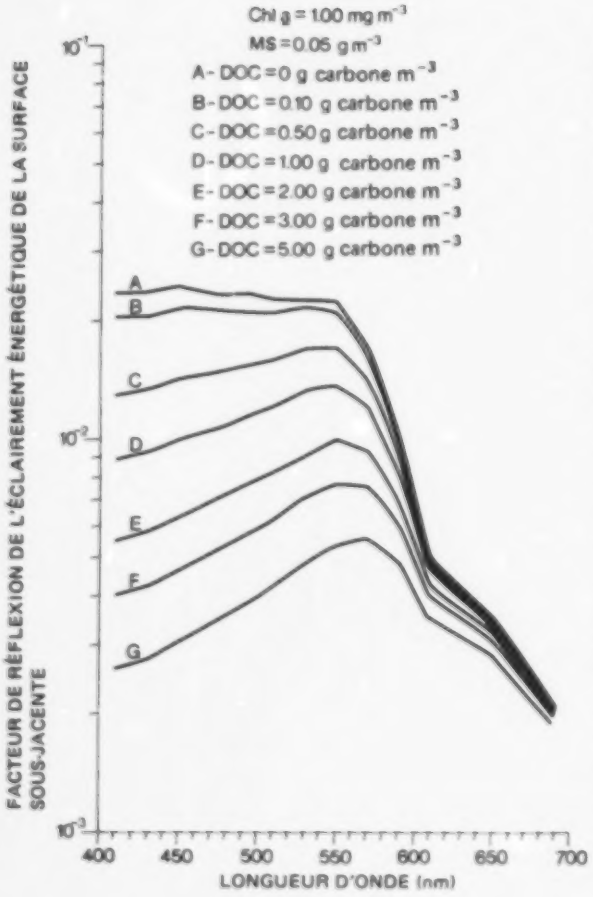

Figure 15. Spectres des facteurs de réflexion de l'éclairement énergétique de la surface sous-jacente pour diverses teneurs en DOC dans une masse d'eau dont la teneur en MS est fixée à 0.05 g m^{-3} et la teneur en chlorophylle *a* est fixée à 1.00 mg m^{-3}.

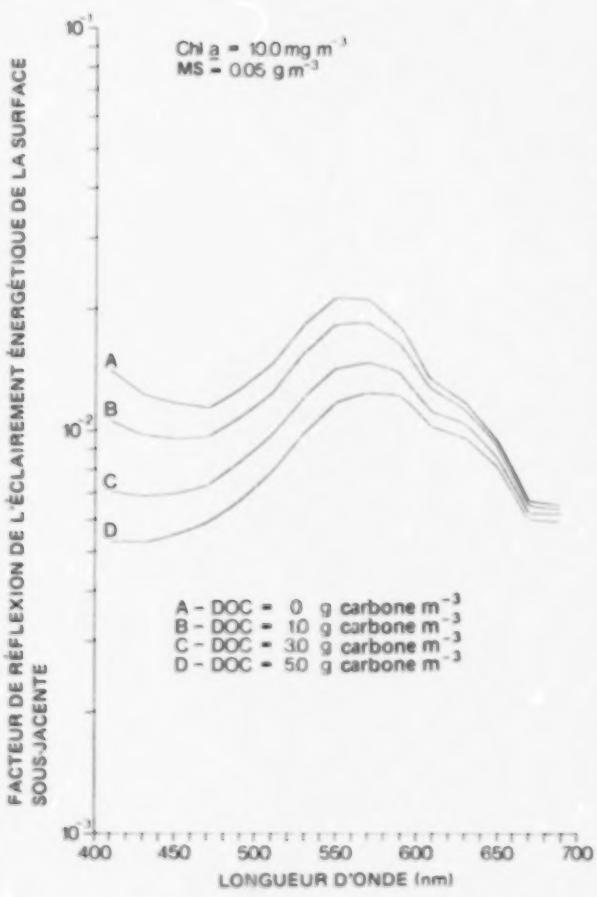

Figure 16. Spectres des facteurs de réflexion de l'éclairement énergétique de la surface sous-jacente pour diverses teneurs en DOC dans une masse d'eau contenant une grande teneur fixe en chlorophylle *a* (10.0 mg m^{-3}) et une petite teneur fixe en MS (0.05 g m^{-3}).

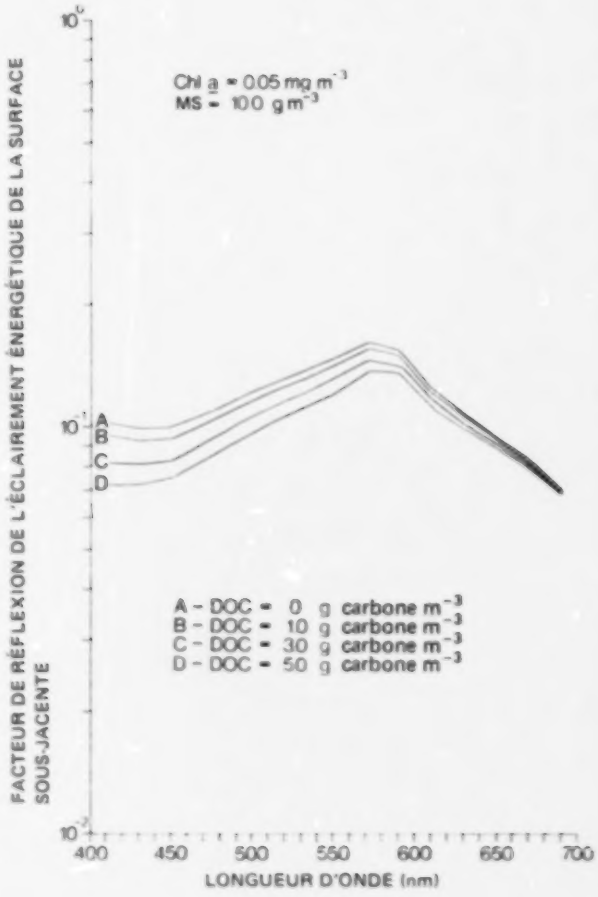

Figure 17. Spectres des facteurs de réflexion de l'éclairement énergétique de la surface sous-jacente pour diverses teneurs en DOC dans une masse d'eau contenant une petite teneur fixe en chlorophylle *a* (0.05 mg m^{-3}) et une grande teneur fixe en MS (10.0 g m^{-3}).

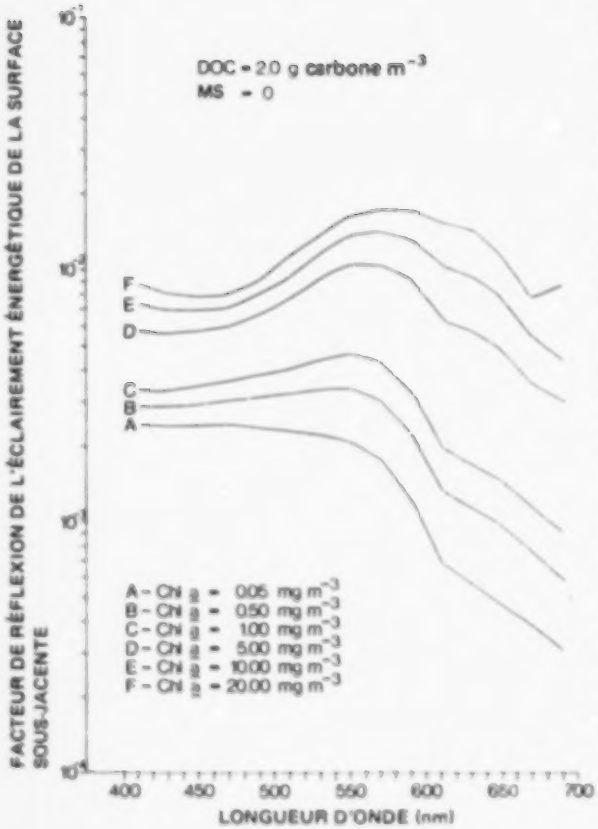

Figure 18. Spectres des facteurs de réflexion de l'éclairement énergétique de la surface sous-jacente pour diverses teneurs en chlorophylle *a* d'une masse d'eau dans laquelle la teneur en DOC est fixée à 2.0 g carbone m^{-3} et la teneur totale en MS est fixée à zéro.

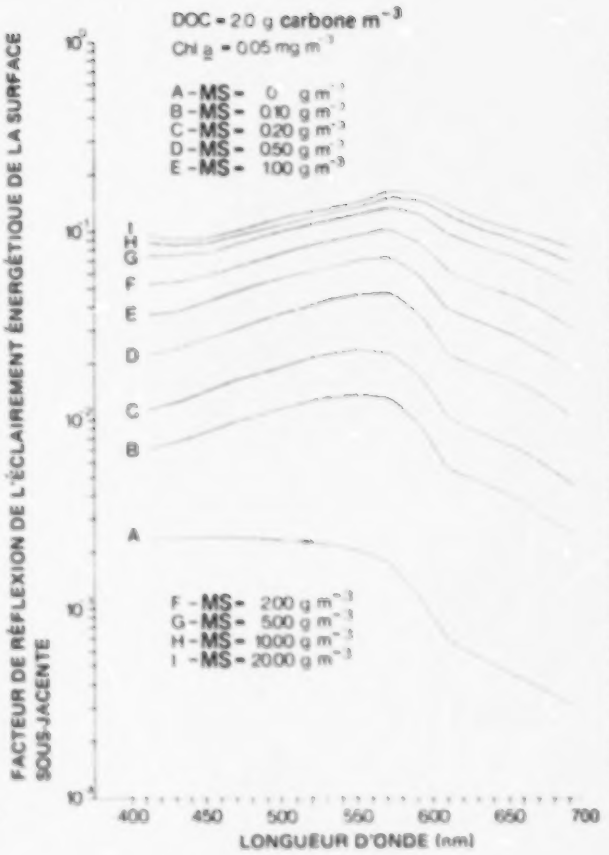

Figure 19. Spectres des facteurs de réflexion de l'éclairement énergétique de la surface sous-jacente pour diverses teneurs en MS d'une masse d'eau dans laquelle la teneur en DOC est fixée à 2.0 g carbone m^{-3} et la teneur en chlorophylle *a* est fixée à 0.05 mg m^{-3}.

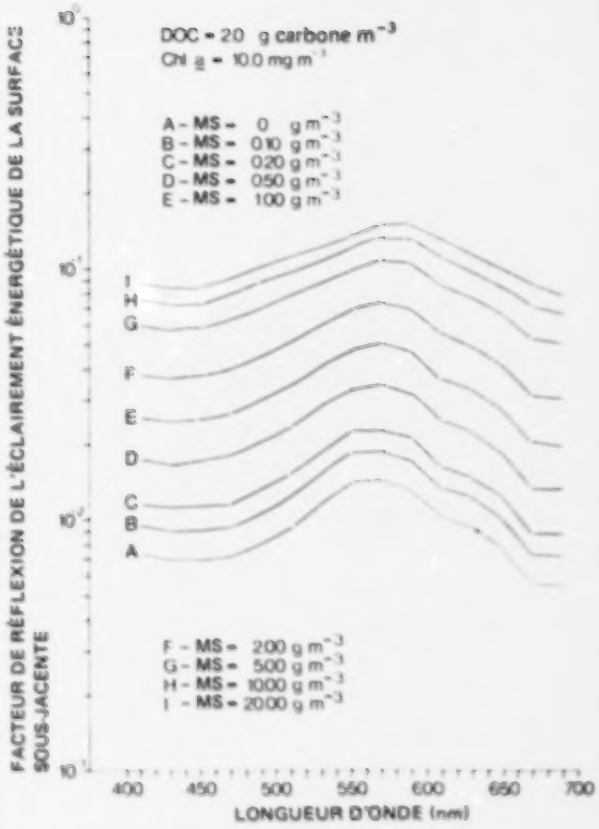

Figure 20. Spectres des facteurs de réflexion de l'éclairement énergétique de la surface sous-jacente pour diverses teneurs en MS d'une masse d'eau dans laquelle la teneur en DOC est fixée à 2.0 g carbone m^{-3} et la teneur en chlorophylle *a* est fixée à 10.0 mg m^{-3}.

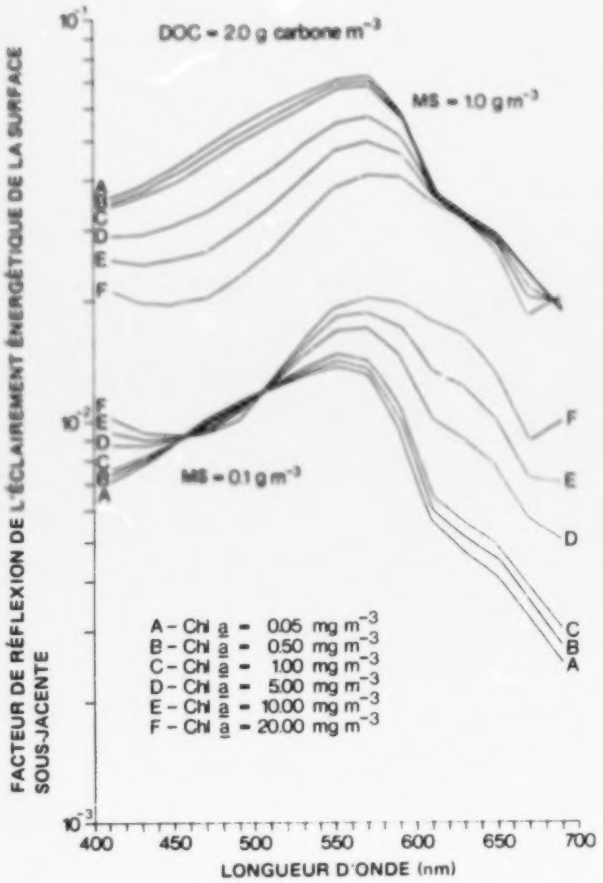

Figure 21. Spectres des facteurs de réflexion de l'éclairement énergétique de la surface sous-jacente pour diverses teneurs en chlorophylle *a* et en MS d'une masse d'eau dans laquelle la teneur en DOC est fixée à 2.0 g carbone m^{-3}.

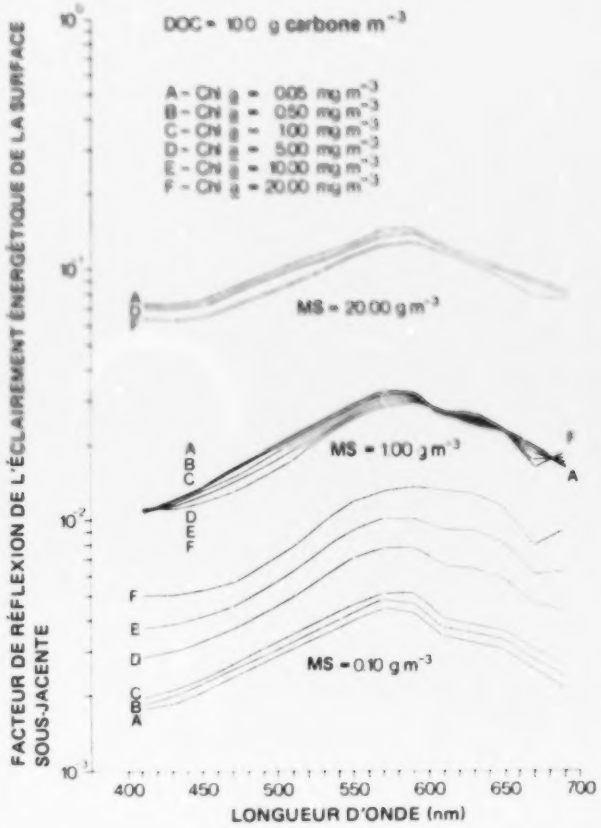

Figure 22. Spectres des facteurs de réflexion de l'éclairement énergétique de la surface sous-jacente pour diverses teneurs en chlorophylle *a* et en MS d'une masse d'eau dans laquelle la teneur en DOC est fixée à 10.0 g carbone m^{-3}.

FACTEUR DE RÉFLEXION DE L'ÉCLAIREMENT ÉNERGÉTIQUE DE LA SURFACE SOUS-JACENTE À UNE SEULE LONGUEUR D'ONDE

Jusqu'à présent, on a tenu compte dans ce rapport des spectres des facteurs de réflexion (410 à 690 nm), et on a supposé qu'il était techniquement possible d'établir ces spectres *in situ*. Toutefois, la plupart des recherches optiques sont effectuées avec des appareils de mesure monobandes de l'éclairement énergétique. Dans la présente section, on évalue la possibilité d'appliquer ces appareils monobandes à l'estimation des paramètres de la qualité de l'eau en utilisant le facteur de réflexion en volume mesuré à une seule longueur d'onde. Étant donné qu'il est commode de séparer le spectre visible en une composante bleue, une composante verte et une composante rouge, on retient comme base dans les analyses à venir trois longueurs d'onde, une pour chaque composante, bleue (450 nm), verte (570 nm) et rouge (650 nm).

Les courbes des sections efficaces d'absorption en fonction de la longueur d'onde, données à la figure 2, montrent sans équivoque l'influence plus prononcée du carbone organique en solution sur le facteur de réflexion de l'éclairement énergétique dans la région bleue du spectre visible, et son influence moins prononcée dans la région rouge de ce spectre. Par conséquent, il est possible d'obtenir une certaine approximation d'une masse d'eau naturelle, dans les longueurs d'onde du rouge, au moyen d'un modèle à trois composantes (eau pure, chlorophylle et minéraux en suspension). Ceci nous permet donc de prévoir que les estimations des teneurs en chlorophylle ou en minéraux en suspension, découlant, le cas échéant, d'une mesure du facteur de réflexion à une seule longueur d'onde seront probablement plus justes si la longueur d'onde choisie est dans la partie rouge du spectre. L'analyse suivante démontre qu'une telle prévision est en fait valable.

La figure 23 illustre la famille des courbes reliant les facteurs de réflexion de l'éclairement énergétique à 450 nm (bleue) et les teneurs en chlorophylle d'une masse d'eau dans laquelle la concentration en DOC est constante à 2.0 g carbone m^{-3} (une moyenne pas déraisonnable pour les grandes masses d'eau naturelles) et la teneur en minéraux en suspension varie de 0 à 20 g m^{-3}. On déduit facilement de cette figure que ces facteurs de réflexion à 450 nm (bleue) réagissent très faiblement à un changement de la chlorophylle. Des courbes analogues entre le facteur de réflexion de l'éclairement énergétique dans le bleu et les teneurs en chlorophylle peuvent être tracées pour d'autres à teneurs en DOC, ce qui met bien en évidence l'inutilité de chercher à estimer les teneurs en chlorophylle à partir du seul facteur de réflexion de l'éclairement à 450 nm.

Dans le même ordre d'idées, la figure 24 montre ce qui arrive lorsque le facteur de réflexion à 570 nm (vert) est utilisé pour estimer la teneur en chlorophylle à partir d'une mesure faite à une seule longueur d'onde. Comme on le voit, même si le facteur de réflexion dans le vert semble varier modérément dans le cas d'une masse d'eau ne renfermant aucun minéral en suspension, cette variation s'amenuise rapidement dès qu'il y a dans l'eau une trace de minéral en suspension (inférieure à 0.10 g m^{-3}).

L'observation de la figure 25, analogue aux figures 23 et 24, élimine de même la mesure du facteur de réflexion à 650 nm (rouge) comme moyen d'estimer les teneurs en chlorophylle, malgré le fait que la variation de ce rapport pour les masses d'eau très pure (c'est-à-dire sans teneur de minéraux en suspension) est légèrement plus grande dans le rouge que dans le vert. On peut donc déduire des figures 23 à 25 qu'il est impossible d'estimer des teneurs en chlorophylle fiables à partir de mesures des facteurs de réflexion de l'éclairement énergétique (facteur de réflexion en volume) faites à une seule longueur d'onde.

À la figure 26 on peut voir la famille des courbes mettant en rapport les facteurs de réflexion à 450 nm (bleu) et les teneurs en minéraux en suspension pour une masse d'eau dont la teneur en DOC est constante à 2.0 g carbone m^{-3} et la teneur en chlorophylle varie de 0.05 mg m^{-3} à 20.0 mg m^{-3}. Cette figure semble montrer qu'il y a une variation assez intéressante du facteur de réflexion dans le bleu lorsque change la teneur en minéraux en suspension (qu'il faut rapprocher de la variation presque nulle de ce facteur de réflexion lorsque varie la teneur en chlorophylle, voir figure 24). Cependant, comme on l'a mentionné précédemment, les répercussions maximales du DOC s'observent dans la région bleue du spectre. C'est ce qu'on peut voir à la figure 27 sur laquelle on a reporté l'intervalle observable des facteurs de réflexion de l'éclairement énergétique à 450 nm (bleu) en fonction de la teneur en minéraux en suspension pour une masse d'eau dont les teneurs en DOC varient de 0 à 5 g carbone m^{-3} et les teneurs en chlorophylle *a*, de 0.05 à 20.0 mg m^{-3}. La variation du facteur de réflexion en volume dans le bleu par suite du changement de la teneur en minéraux en suspension se révèlerait rapidement beaucoup moins intéressante qu'on ne l'avait pensé au début.

La sensibilité du facteur de réflexion à 570 nm (vert) par rapport aux changements de la teneur en minéraux en suspension pour une masse d'eau ayant une teneur fixe en DOC de 2.0 g carbone m^{-3} est illustrée à la figure 28 pour diverses valeurs de la teneur en chlorophylle. La présence de chlorophylle joue un rôle manifestement plus important sur le facteur de réflexion pour les longueurs d'onde dans le vert, lorsque les teneurs en minéral en suspension sont

faibles, que celui qu'elle joue pour les longueurs d'onde dans le bleu. Toutefois, le facteur de réflexion en volume varie moins dans le vert que dans le bleu lorsque changent les teneurs en DOC. La figure 29, analogue à la figure 27, montre comment varie la plage observable des facteurs de réflexion à 570 nm (vert) en fonction de la teneur en minéraux en suspension pour une masse d'eau dans laquelle la teneur en DOC varie de 0 à 5 g carbone m^{-3} et les teneurs en chlorophylle, entre 0.05 et 20.0 mg m^{-3}. Même si la réponse du facteur de réflexion à 570 nm aux changements de la teneur en minéraux en suspension n'autorise pas une estimation fiable de la teneur en minéraux en suspension à partir d'un facteur de réflexion mesuré à une seule longueur d'onde de la région verte du spectre, cette réponse constitue quand même une nette amélioration par rapport à celle observée à la figure 27 (facteur de réflexion en volume dans le bleu).

Les variations du facteur de réflexion à 650 nm (rouge) lorsque change la teneur en minéraux en suspension dans une masse d'eau contenant une teneur fixe en DOC de 2.0 g carbone m^{-3} sont montrées à la figure 30 pour différentes teneurs en chlorophylle. Le rôle très important joué par la chlorophylle sur le facteur de réflexion en volume dans le rouge, qu'on observe dans des masses d'eau contenant peu de minéraux en suspension, est la caractéristique la plus remarquable de la figure 30. En considérant seulement la répercussion minimale des teneurs en DOC sur les facteurs en volume observables dans la région rouge du spectre on peut tracer la courbe de sensibilité de la figure 31. Semblable aux figures 27 et 29, la figure 31 nous fait voir la variation des plages observables des facteurs de réflexion à 650 nm en fonction de la teneur en minéraux en suspension pour une masse d'eau dont la teneur en DOC varie entre 0 et 5 g carbone m^{-3} et la teneur en chlorophylle varie entre 0.05 et 20.0 mg m^{-3}. On s'aperçoit donc qu'il est possible d'affirmer que le facteur de réflexion à 650 nm manifeste une variation raisonnable en fonction de la teneur en minéraux en suspension, surtout lorsque celle-ci est plus grande que ~0.10 g m^{-3}, et conséquemment, il semble y avoir possibilité, à partir de la mesure du facteur de réflexion en volume dans le rouge, d'estimer les teneurs en minéraux en suspension dans la plupart des eaux lacustres naturelles.

La nature asymptotique de la figure 31 ne fait pas de doute. Comme nous l'apprend l'équation 7, R(0,650) approche de façon asymptotique de la valeur approximative $\frac{1}{3} \cdot \frac{Bb(650)}{a(650) + Bb(650)}$ ce qui a pour effet de rendre assez imprécise toute détermination des teneurs en minéraux en suspension au-delà de ~40 g m^{-3}. Toutefois, dans l'intervalle général 0.10 g $m^{-3} < C_{MC} < 40$ g m^{-3}, une seule mesure du facteur à 650 nm peut fournir une estimation raisonnable de la teneur en minéraux en suspension malgré l'activité optique concurrente découlant simultanément de la présence de chlorophylle et d'une substance organique en solution dans la masse d'eau.

La sensibilité du facteur de réflexion à 650 nm par rapport à la teneur en minéraux est plus marquée si les mesures optiques *in situ* faites à une seule longueur d'onde ont lieu dans des eaux naturelles dans lesquelles l'activité biologique n'est pas excessive (comme dans l'eau de mer, les lacs et les rivières oligotrophes et mésotrophes). C'est d'ailleurs ce que montre la figure 32 où l'on peut voir la variation des plages observables des facteurs de réflexion à 650 nm en fonction de la teneur en minéraux en suspension pour une masse d'eau dans laquelle la teneur en chlorophylle ne varie que de $0.05 \leq C_{Chl} \leq 5.0$ mg m^{-3}. On voit immédiatement que la sensibilité est plus marquée.

On peut donc dire, en résumé, que les groupements optiques complexes des masses d'eau intérieures constituent des obstacles presque insurmontables à l'utilisation des mesures des facteurs de réflexion à une seule longueur l'onde comme paramètres de déduction des indicateurs de la qualité de l'eau. Il est tout à fait irréalisable de chercher à obtenir des estimations valables de la teneur en chlorophylle à partir de mesures à une seule longueur d'onde, quelle que soit la longueur d'onde utilisée. Également, les régions bleue et verte du spectre visible sont des domaines de longueurs d'onde ne convenant aucunement à la recherche d'une estimation des teneurs en minéral en suspension en raison principalement de l'interférence due à la substance organique en solution. En dépit des contraintes sévères qu'impose l'interférence optique des teneurs en chlorophylle (notamment lorsque les teneurs en minéraux en suspension sont faibles), il est possible d'appliquer les mesures de l'éclairement énergétique dans la région rouge du spectre à l'estimation des teneurs faibles à moyennes en minéraux en suspension.

En conclusion, même si les mesures directes du facteur de réflexion peuvent servir à la déduction des indicateurs de la qualité de l'eau, il est évident qu'il faut tenir compte de la totalité du spectre des facteurs de réflexion de l'éclairement énergétique de la surface sous-jacente.

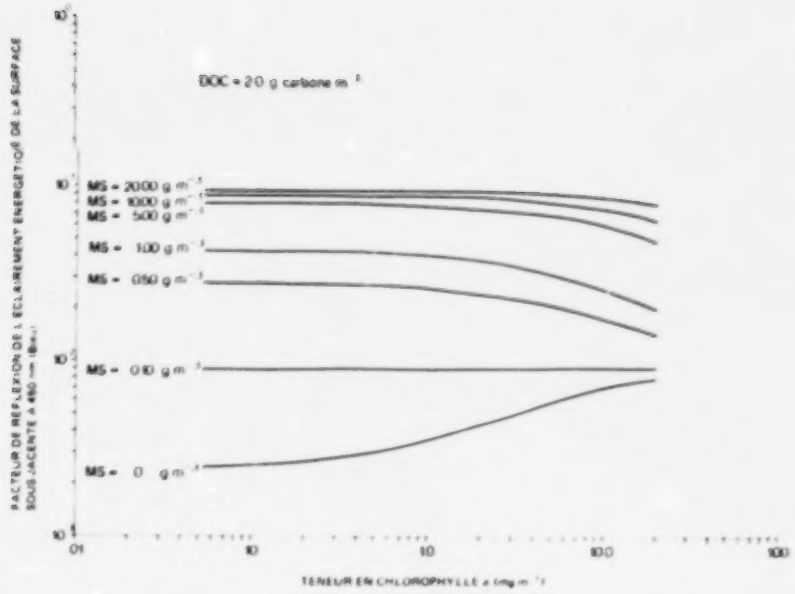

Figure 23. **Relations entre les facteurs de réflexion à 450 nm (bleu) et une teneur en chlorophylle *a* d'une masse d'eau dans laquelle la teneur en DOC est fixée à 2.0 g carbone m^{-3} et la teneur en MS varie entre zéro et 20 g m^{-3}.**

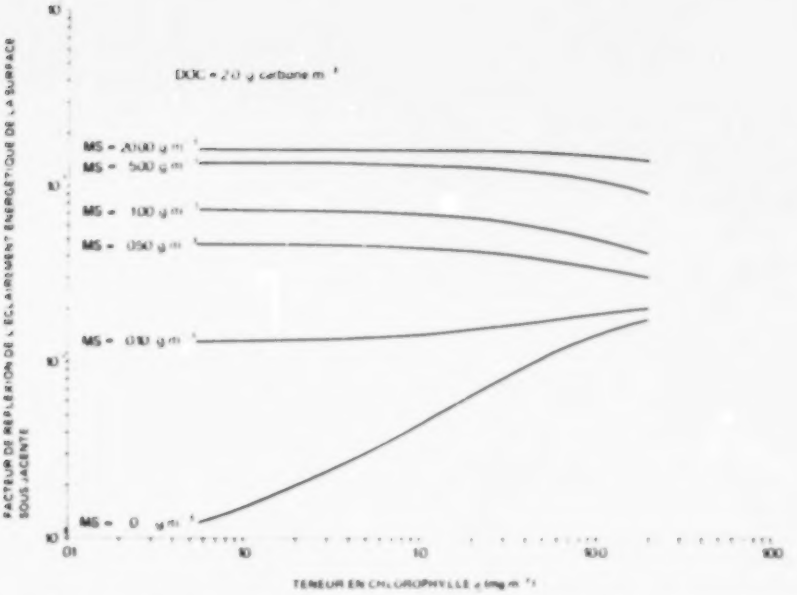

Figure 24. **Relations entre les facteurs de réflexion à 570 nm (vert) et une teneur en chlorophylle *a* d'une masse d'eau dans laquelle la teneur en DOC est fixée à 2.0 g carbone m^{-3} et la teneur en MS varie entre zéro et 20 g m^{-3}.**

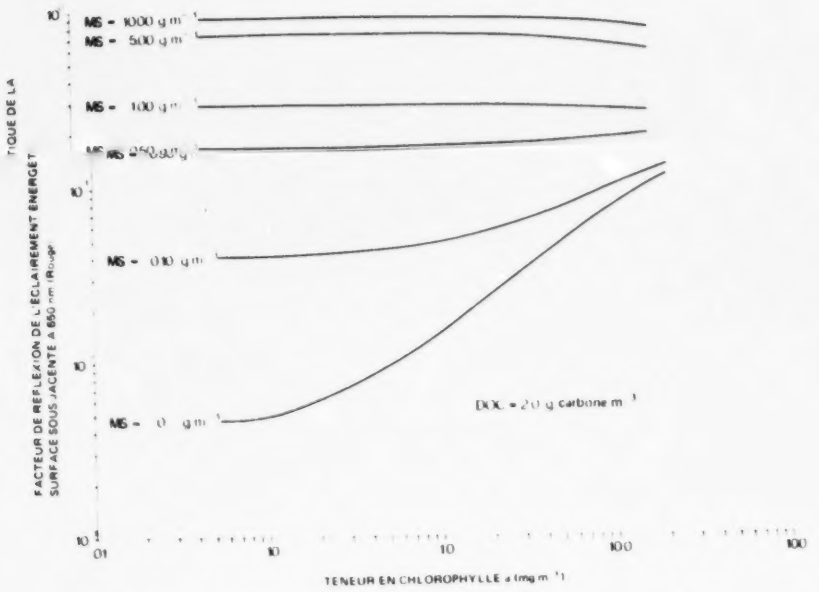

Figure 25. **Relations entre les facteurs de réflexion à 650 nm (rouge) et une teneur en chlorophylle *a* d'une masse d'eau dans laquelle la teneur en DOC est fixée à 2.0 g carbone m^{-3} et la teneur en MS varie entre zéro et 10 g m^{-3}.**

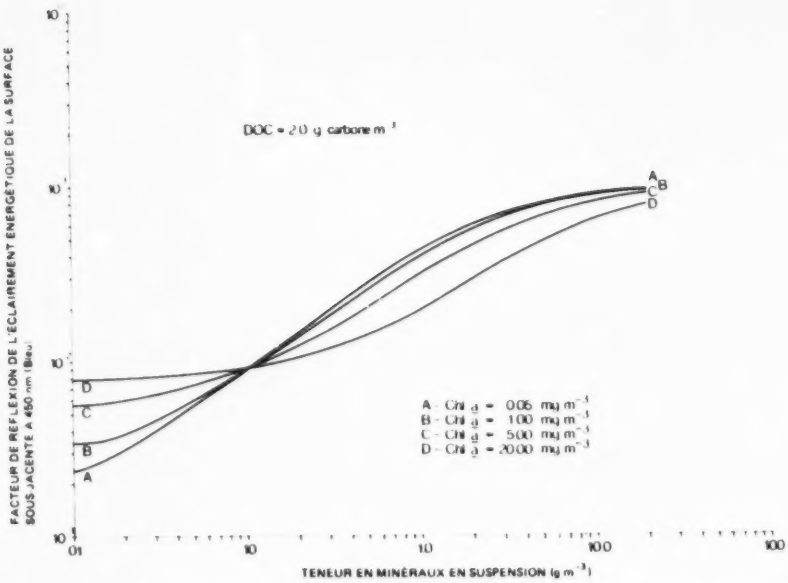

Figure 26. **Relations entre les facteurs de réflexion à 450 nm (bleu) et la teneur en MS pour plusieurs teneurs discrètes en chlorophylle *a* d'une masse d'eau dans laquelle la teneur en DOC est fixée à 2.0 g carbone m^{-3}.**

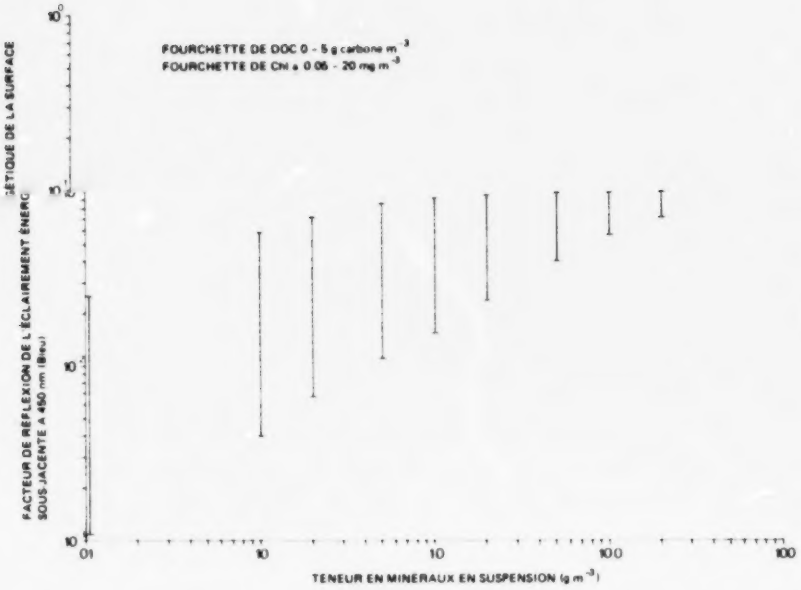

Figure 27. **Relations entre les facteurs de réflexion à 450 nm (bleu) et la teneur en MS d'une masse d'eau dans laquelle la teneur en DOC varie entre zéro et 5 g carbone m^{-3} et la teneur en chlorophylle *a* varie entre 0.05 et 20.0 mg m^{-3}.**

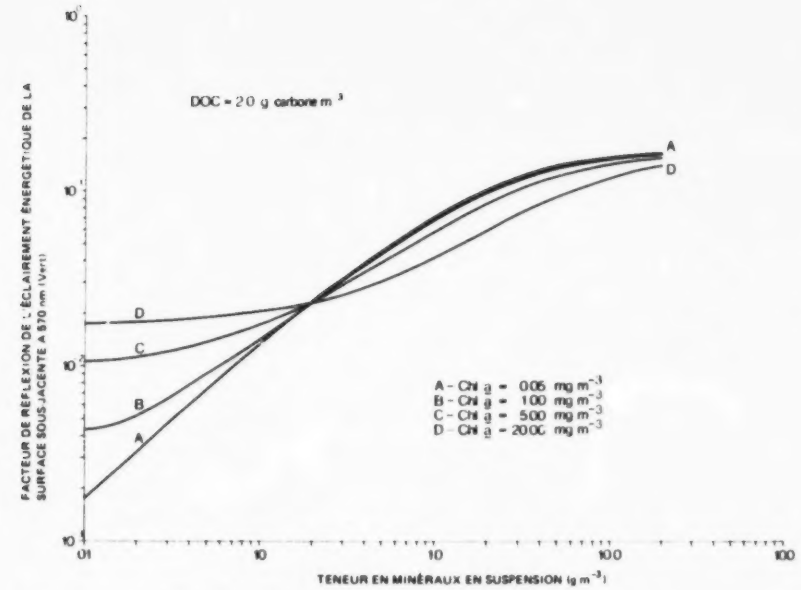

Figure 28. **Relations entre les facteurs de réflexion à 570 nm (vert) et la teneur en MS pour plusieurs teneurs discrètes en chlorophylle *a* d'une masse d'eau dans laquelle la teneur en DOC est fixée à 2.0 g carbone m^{-3}.**

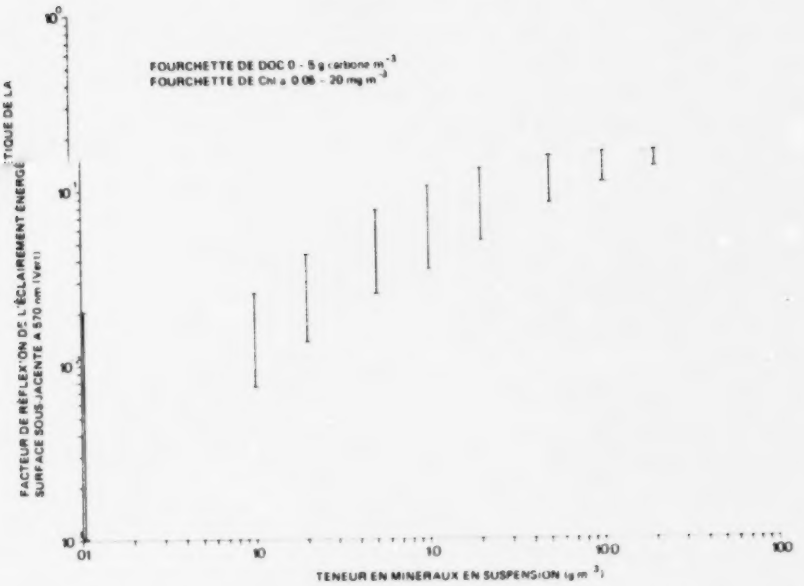

Figure 29. **Relations entre les facteurs de réflexion à 570 nm (vert) et la teneur en MS d'une masse d'eau dans laquelle la teneur en DOC varie entre zéro et 5 g carbone m^{-3} et la teneur en chlorophylle *a* varie entre 0.05 et 20.0 mg m^{-3}.**

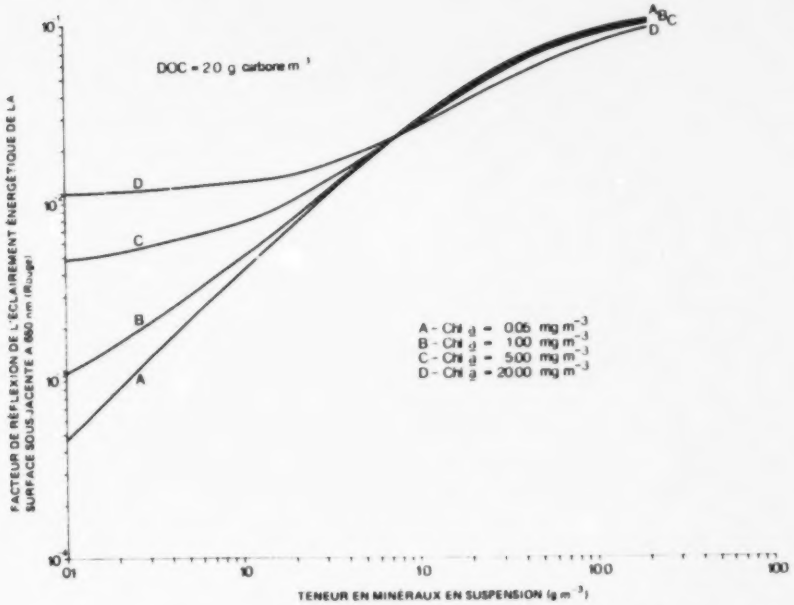

Figure 30. **Relations entre les facteurs de réflexion à 650 nm (rouge) et la teneur en MS pour plusieurs teneurs discrètes en chlorophylle *a* d'une masse d'eau dans laquelle la teneur en DOC est fixée à 2.0 g carbone m^{-3}.**

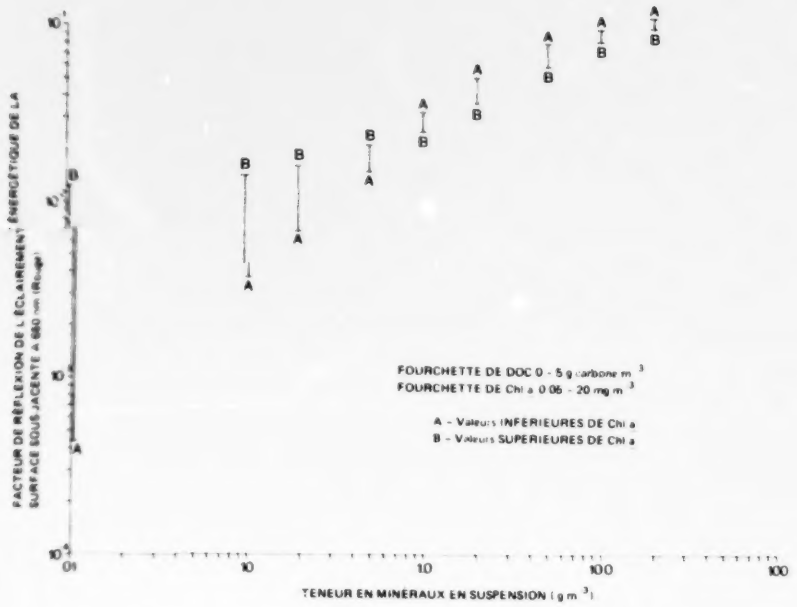

Figure 31. **Relations entre les facteurs de réflexion à 650 nm (rouge) et la teneur en MS d'une masse d'eau dans laquelle la teneur en DOC varie entre zéro et 5 g carbone m^{-3} et la teneur en chlorophylle *a* varie entre 0.05 et 20.0 mg m^{-3}.**

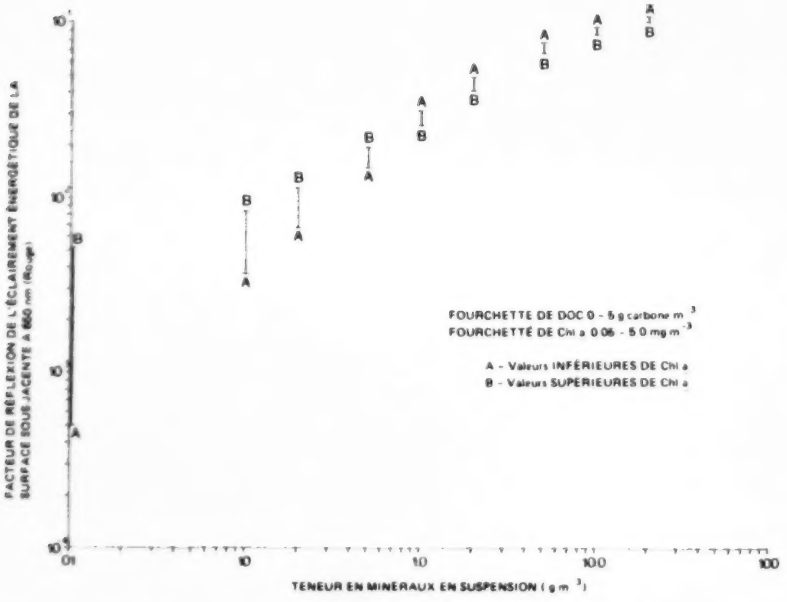

Figure 32. **Relations entre les facteurs de réflexion à 650 nm (rouge) et la teneur en MS d'une masse d'eau dans laquelle la teneur en DOC varie entre zéro et 5 g carbone m^{-3} et la teneur en chlorophylle *a* varie entre 0.05 et 5.0 mg m^{-3}.**

RELATIONS ENTRE LES PARAMÈTRES OPTIQUES ET LES PARAMÈTRES DE LA QUALITÉ DE L'EAU

On se propose ici de définir au moyen d'expressions mathématiques les relations entre le facteur de réflexion en volume et les paramètres de la qualité de l'eau. Autrement dit, on veut analyser le changement des spectres des facteurs de réflexion en volume observé lorsqu'on varie simultanément les teneurs en chlorophylle, en minéraux en suspension et en carbone organique en solution. Les équations résultantes devraient témoigner des difficultés rencontrées dans la recherche des relations mathématiques établissant les paramètres de la qualité de l'eau à partir de la mesure directe du spectre des facteurs de réflexion en volume (de l'éclairement énergétique de la surface sous-jacente) de même que de la nécessité de recourir à une technique d'optimisation à plusieurs variables pour extraire de ces spectres optiques les informations sur la qualité de l'eau. Le lecteur peut, sans rien perdre de la compréhension du présent document, choisir de sauter le traitement donné ici et passer à la section suivante.

Imaginons une masse d'eau homogène contenant en plus de l'eau, de la chlorophylle, des minéraux en suspension et un carbone organique en solution. Les teneurs de ces quatre éléments sont respectivement C_w, C_{Chl}, C_{MS} et C_{DOC}. Le facteur de réflexion en volume à la longueur d'onde λ, $R(\lambda)$, est une fonction de ces teneurs et des sections efficaces optiques, à savoir,

$$R(\lambda) = f(C_w a_w,\ C_{Chl}a_{Chl},\ C_{MS}a_{MS},\ C_{DOC}a_{DOC},\ C_w(Bb)_w,\ C_{Chl}(Bb)_{Chl},\ C_{MS}(Bb)_{MS}) \quad (8)$$

où on a choisi, pour simplifier la notation, de ne pas inscrire la dépendance des sections efficaces optiques à l'égard de la longueur d'onde.

Le taux de changement du facteur de réflexion en volume par rapport à la longueur d'onde $\frac{dR(\lambda)}{d\lambda}$ (c'est-à-dire la pente à la longueur d'onde λ du spectre des facteurs de réflexion en volume mesuré), est défini ainsi :

$$\frac{dR(\lambda)}{d\lambda} = \frac{\partial R}{\partial a_w}\cdot\frac{\partial a_w}{\partial \lambda} + C_{Chl}\frac{\partial R}{\partial a_{Chl}}\cdot\frac{\partial a_{Chl}}{\partial \lambda} + C_{MS}\frac{\partial R}{\partial a_{MS}}\cdot\frac{\partial a_{MS}}{\partial \lambda} + C_{DOC}\frac{\partial R}{\partial a_{DOC}}\cdot\frac{\partial a_{DOC}}{\partial \lambda} + \frac{\partial R}{\partial (Bb)_w}\cdot\frac{\partial (Bb)_w}{\partial \lambda} + C_{Chl}\frac{\partial R}{\partial (Bb)_{Chl}}\cdot\frac{\partial (Bb)_{Chl}}{\partial \lambda} + C_{MS}\frac{\partial R}{\partial (Bb)_{MS}}\cdot\frac{\partial (Bb)_{MS}}{\partial \lambda} \quad (9)$$

où C_w a été fixé à 1, et où les dérivées partielles des sections efficaces optiques (qui sont fonction de λ) sont définies par la forme des courbes illustrées aux figures 2 et 3 (à l'exception de la figure 3 dans laquelle chaque point doit être multiplié par son $B(\lambda)$ correspondant).

L'équation 7 nous apprend que le facteur de réflexion en volume $R(\lambda)$ est donné par :

$$R(\lambda) = \sum_{n=0}^{3} r_n \left[\frac{(Bb)(\lambda)}{a(\lambda) + (Bb)(\lambda)}\right]^n = \sum_{n=0}^{3} r_n \left[\frac{u(\lambda)}{v(\lambda)}\right]^n \quad (10)$$

où $u(\lambda) = (Bb)_w + C_{Chl}(Bb)_{Chl} + C_{MS}(Bb)_{MS}$

$v(\lambda) = a_w + C_{Chl}a_{Chl} + C_{MS}a_{MS} + C_{DOC}a_{DOC} + (Bb)_w + C_{Chl}(Bb)_{Chl} + C_{MS}(Bb)_{MS}$

En prenant la dérivée partielle de l'équation 10 par rapport à chacune des sections efficaces optiques, il vient :

$$\frac{\partial R}{\partial a_w} = -\frac{Nu}{v^2}$$

$$\frac{\partial R}{\partial a_{Chl}} = -\frac{N C_{Chl} u}{v^2}$$

$$\frac{\partial R}{\partial a_{MS}} = -\frac{N C_{MS} u}{v^2}$$

$$\frac{\partial R}{\partial a_{DOC}} = -\frac{N C_{DOC} u}{v^2} \quad (11)$$

$$\frac{\partial R}{\partial (Bb)_w} = \frac{N(v-u)}{v^2}$$

$$\frac{\partial R}{\partial (Bb)_{Chl}} = \frac{N C_{Chl}(v-u)}{v^2}$$

$$\frac{\partial R}{\partial (Bb)_{MS}} = \frac{N C_{MS}(v-u)}{v^2}$$

où $N = r_1 + 2r_2\frac{u}{v} + 3r_3\frac{u^2}{v^2}$

et r_1, r_2 et r_3 sont les coefficients du développement donné par l'équation 7.

En substituant le système d'équations 11 dans l'équation 9, on trouve :

$$\frac{dR(\lambda)}{d\lambda} = -\frac{Nu}{v^2}\left[\frac{\partial a_w}{\partial\lambda} + C_{Chl}{}^2\,\frac{\partial a_{Chl}}{\partial\lambda} + C_{MS}{}^2\,\frac{\partial a_{MS}}{\partial\lambda} + C_{DOC}{}^2\,\frac{\partial a_{DOC}}{\partial\lambda}\right] + \frac{N(v-u)}{v^2}\left[\frac{\partial (Bb)_w}{\partial\lambda} + C_{Chl}{}^2\,\frac{\partial (Bb)_{Chl}}{\partial\lambda} + C_{MS}{}^2\,\frac{\partial (Bb)_{MS}}{\partial\lambda}\right] \qquad (12)$$

où u, v et N sont des fonctions de C_{Chl}, C_{MS} et C_{DOC} déjà définis.

L'équation 12 met donc en rapport la pente d'un spectre des facteurs de réflexion de l'éclairement énergétique dans la surface sous-jacente, mesuré directement à la longueur λ, et les teneurs en chlorophylle, en minéraux en suspension et en carbone organique en solution qui sont à l'origine du spectre observé. Chercher, à l'aide de l'équation 12, à estimer les teneurs C_{Chl}, C_{MS} et C_{DOC} teneurs qui décrivent la masse d'eau à partir de trois équations simultanées (pour trois valeurs discrètes de λ par exemple) est une tâche semée d'embûches. Du fait que les sections efficaces optiques dépendent de la longueur d'onde, il tombe sous le sens qu'on doit non seulement faire un choix judicieux des longueurs d'onde (λ), mais également déterminer très précisément les pentes. Au surplus, il est obligatoire d'avoir des valeurs très précises de $\frac{dR(\lambda)}{d\lambda}$; d'ailleurs le problème se complique du fait que ces pentes peuvent être très petites en plus d'être soit positives ou négatives. Les valeurs de N, v et u sont elles-mêmes des fonctions de C_{Chl}, C_{MS} et C_{DOC} (c'est-à-dire des paramètres que l'on cherche). Toutefois, ce dernier problème peut être surmonté, tout au moins en principe. Puisque $u(\lambda) = (Bb)(\lambda)$ et $v(\lambda) = a(\lambda) + (Bb)(\lambda)$, on peut obtenir les valeurs nécessaires de u, v et N grâce à une détermination des propriétés inhérentes en volume $(Bb)(\lambda)$ (coefficient de rétrodiffusion totale) et $a(\lambda)$ (coefficient d'absorption totale) selon la méthode décrite dans les premières sections de ce rapport.

L'équation 12 nous permet donc, en principe, de définir trois équations (correspondant à trois longueurs d'onde bien choisies) que l'on peut résoudre simultanément pour trouver les indicateurs de la qualité de l'eau C_{Chl}, C_{MS} et C_{DOC}. Toutefois, le fardeau qu'impose la détermination précise de petites pentes pour les spectres des paramètres optiques mesurés et disponibles a pour effet de diminuer la fiabilité et la reproductibilité de ces calculs mathématiques. Le besoin de déterminer $a(\lambda)$ et $(Bb)(\lambda)$ lors de chaque mesure *in situ* du spectre de l'éclairement énergétique de la surface sous-jacente rend encore plus déplaisante l'utilisation de l'équation 12. L'idéal est de rechercher une méthode de déduction des indicateurs de la qualité de l'eau à partir du spectre des facteurs de réflexion en volume pour une seule longueur d'onde. L'objet de la section suivante est précisément de décrire une telle méthode.

LA TECHNIQUE D'OPTIMISATION À PLUSIEURS VARIABLES

Voici le problème fondamental à résoudre : Soit un spectre mesuré $R(0,\lambda)$ défini mathématiquement par l'équation 7 (c'est-à-dire que $R(0,\lambda)$ est une fonction développée en série de $a(\lambda)$ et $Bb(\lambda)$, eux-mêmes des fonctions des sections efficaces optiques et des teneurs en chlorophylle, en minéraux en suspension et en DOC), trouver les teneurs en chlorophylle, en minéraux en suspension et en DOC qui donnent le spectre se rapprochant le plus du spectre mesuré.

Évidemment, une technique d'optimisation à plusieurs variables permettant d'obtenir «le meilleur ajustement» des teneurs en chlorophylle, en minéraux en suspension et en carbone organique en solution devrait convenir aussi bien à la résolution du problème inverse, c'est-à-dire à la déduction, à partir des spectres mesurés et des teneurs correspondantes en chlorophylle, en minéraux en suspension et en carbone organique en solution qui provoquent ces spectres, des valeurs des sections efficaces d'absorption et de diffusion (en fonction de λ) qui donnent le spectre des facteurs de réflexion se rapprochant le plus de celui mesuré.

On décrit en détail ici la technique d'optimisation à plusieurs variables à laquelle on a recours à la Section d'optique environnementale de l'Institut national de recherches sur les eaux pour (a) chercher à déduire les indicateurs de la qualité de l'eau à partir des mesures *in situ* des spectres des facteurs de réflexion de l'éclairement énergétique de la surface sous-jacente dans la gamme de 400 à 700 nm et (b) chercher à déterminer les sections efficaces optiques à partir de mesures *in situ* des facteurs de réflexion et des mesures de la qualité de l'eau relevées en même temps.

Dans la section précédente, on a fait état de quelques-unes des difficultés mathématiques que soulève la recherche d'une solution analytique de l'équation 7. Toutefois, il existe des techniques numériques qui permettent d'éviter ces difficultés.

Réécrivons l'équation 7 sous forme vectorielle, ce qui donne :

$$R(0,\underline{a}(\lambda),\underline{Bb}(\lambda),\underline{C}) = \sum_{n=0}^{3} r_n(0)\ [1 + (\underline{a}(\lambda) \cdot \underline{C})/ (\underline{Bb}(\lambda) \cdot \underline{C})]^{-n} \qquad (13)$$

où

$$\underline{a}(\lambda) = (a_w(\lambda), a_{Chl}(\lambda), a_{MS}(\lambda), a_{DOC}(\lambda))$$

$$\underline{Bb}(\lambda) = (Bb_w(\lambda), Bb_{Chl}(\lambda), Bb_{MS}(\lambda), 0)$$

$$\underline{C} = (1, C_{Chl}, C_{MS}\ C_{DOC})$$

À partir d'un spectre mesuré $\{S_i\}$ formé d'un ensemble de facteurs de réflexion de l'éclairement énergétique pour des valeurs discrètes de λ (par exemple le spectre à 15 points parcourant l'intervalle de 410 à 690 nm par pas de 20 nm), il est donc possible d'écrire ainsi les écarts résiduels pondérés entre les facteurs de réflexion en volume mesuré et les facteurs théoriques $R(0, \underline{a}_i, \underline{Bb}_i, \underline{C})$

$$g_i(\underline{C}) = [S_i - R(0,\underline{a}_i, \underline{Bb}_i, \underline{C})]/R(0,\underline{a}_i, \underline{Bb}_i, \underline{C}) \qquad (14)$$

Dans cette équation on a supposé que les fonctions vectorielles d'absorption et de rétrodiffusion $\underline{a}$ et $\underline{Bb}$ sont connues pour la masse d'eau homogène considérée, et que l'on désire trouver (pour les longueurs d'onde correspondant à $\{S_i\}$) la solution aux moindres carrés multidimensionnelle en minimisant par rapport à $\underline{C}$ la fonction

$$f(\underline{C}) = \sum_i g_i^2(\underline{C}) \qquad (15)$$

La valeur du vecteur teneur $\underline{C}$ qui rend $f(\underline{C})$ minimale sera donc définie comme celle ayant les teneurs des paramètres de la masse d'eau qui donnent lieu au spectre des facteurs de réflexion mesuré $\{S_i\}$.

Le sous-programme ZXSSQ (l'un des programmes de la bibliothèque internationale des mathématiques et des statistiques [IMSL, 1980]) correspond à un algorithme aux différences finies de Levenberg-Marquardt qui convient à des applications d'optimisation non linéaires à plusieurs variables par les moindres carrés (Levenberg, 1944; Marquardt, 1963). À partir d'une valeur initiale appropriée $\underline{C}_o$, cet algorithme détermine systématiquement un minimum local de $f(\underline{C})$. Il se peut toutefois que cette valeur $f(\underline{C})$ ne soit pas la plus petite possible dans la fourchette de validité de $\underline{C}$. C'est la raison pour laquelle on choisit plusieurs points de départ $\{\underline{C}_{oj}\}$ et qu'on détermine le minimum correspondant au moyen de l'algorithme $\{f_j(\underline{C})\}$. Le vecteur $\underline{C}$ correspondant au plus petit de ces minimums $f_j(\underline{C})$ est donc choisi comme la solution appropriée. Il n'y a aucune certitude qu'un point de départ particulier, supposons $\underline{C}_{oj}$, permettra à l'algorithme de trouver un minimum pour $f(\underline{C})$, puisqu'il pourrait y avoir divergence. En outre, il se pourra qu'un vecteur $\underline{C}$ qui est valable mathématiquement n'ait aucune signification physique (par exemple teneurs négatives). Pour pallier ces difficultés, on a mis en oeuvre des suggestions proposées dans les notes du programme IMSL afin de borner le vecteur $\underline{C}$ de la façon suivante

$$C_{iMIN} \leq C_i \leq C_{iMAX} \qquad \text{pour } i = 2,3,4$$

où l'indice i dénote la ith composante de la masse d'eau (par exemple $C_2 = C_{Chl}$, $C_3 = C_{MS}$ et $C_4 = C_{DOC}$), et où une transformation de l'espace borné $\underline{C}$ en un espace non borné $\underline{W}$ $(-\infty < W_i < +\infty)$ est réalisée à l'aide de la relation de fonction d'erreur que voici

$$C_i = C_{iMIN} + C_{iMAX} - C_{iMIN})\ (1 + \text{erf}\ (W_i))/2 \qquad (16)$$

L'algorithme de Levenberg-Marquardt peut être utilisé de la même manière pour déduire les sections efficaces des paramètres à partir de mesures des facteurs de réflexion en volume et des teneurs. Pour ce faire, réécrivons ainsi l'équation 7

$$R(0,\underline{C}(\underline{u}),\underline{X}) = \sum_{n=0}^{3} r_n(0)[1 + (\underline{C}(\underline{u}) \cdot \underline{X})/(\underline{C}'(\underline{u}) \cdot \underline{X})]^{-n} \qquad (17)$$

où

$$\underline{X} = (a_w, a_{Chl}, a_{MS}, a_{DOC}, Bb_w, Bb_{Chl}, Bb_{MS}, 0)$$

$$\underline{C}(\underline{u}) = (1, C_{Chl}(\underline{u}), C_{MS}(\underline{u}), C_{DOC}(\underline{u}), 0, 0, 0, 0)$$

$$\underline{C}'(\underline{u}) = (0, 0, 0, 0, 1, C_{Chl}(\underline{u}), C_{MS}(\underline{u}), C_{DOC}(\underline{u}))$$

Dans le cas présent, $\underline{u}$ est le vecteur définissant la position géographique du vecteur teneur $\underline{C}(\underline{u})$ et $\underline{C}'(\underline{u})$ est simplement une rotation du vecteur $\underline{C}(\underline{u})$ dans l'espace multidimensionnel.

Soit un ensemble de facteurs de réflexion en volume $\{S_j\}$ pour la longueur d'onde λ_i et les teneurs correspondantes $\{\underline{C}_j\}$ à un nombre j de stations, pour lesquelles on suppose que les sections efficaces sont invariables; on peut donc écrire les écarts résiduels pondérés $g_j(\underline{X})$ ainsi :

$$g_j(\underline{X}) = [S_j - R(0,\underline{C}_j,\underline{X})]/R(0,\underline{C}_j,\underline{X}) \qquad (18)$$

la solution aux moindres carrés est donc à nouveau déterminée en minimisant par rapport à $\underline{X}$ la fonction

$$f(\underline{X}) = \sum_j g_j^2(\underline{X}) \qquad (19)$$

Comme précédemment, on impose les bornes appropriées à $\underline{X}$

$$X_{iMIN} < X_i < {}^{i}_{MAX} \qquad \text{pour } i = 1,2\ldots7$$

(par ex. $X_1 = a_w$, $X_2 = a_{Chl}$ ..... $X_7 = Bb_{MS}$)

et l'algorithme agit dans l'espace $\underline{W}$ conformément à la transformation par la fonction d'erreur

$$X_i = X_{iMIN} + (X_{iMAX} - X_{iMIN})(1 + \text{erf } (W_i))/2 \qquad (20)$$

La solution aux moindres carrés résultante pour $\underline{X}$ n'est évidemment applicable qu'à la longueur d'onde particulière à laquelle correspondent les $\{S_j\}$, de sorte que la même procédure doit être répétée pour chaque longueur d'onde pour laquelle on veut connaître $\underline{X}$. De cette façon, il est possible de déterminer tout le spectre des sections efficaces $\underline{X}(\lambda)$.

Malgré le fait qu'on utilise dans chaque cas une procédure Levenberg-Marquardt analogue, la détermination de $\underline{X}$ est fondamentalement plus complexe que celle de $\underline{C}$, puisque la dimension de l'espace $\underline{X}$ est égale à deux fois la dimension de l'espace $\underline{C}$. Un spectre des facteurs de réflexion en volume de 15 points relevés à une seule station suffit à déduire les trois composantes variables de $\underline{C}$ de cette station. En revanche, il faut beaucoup plus de données que celles provenant de 15 stations pour déduire les sept composantes variables de $\underline{X}$ tout en empêchant que diverge l'algorithme. En l'absence d'un nombre suffisant de stations, on diminue les dimensions de $\underline{X}$ en fournissant des sections efficaces fixes pour certaines composantes de $\underline{X}$ (par exemple on peut utiliser les spectres des sections efficaces d'absorption et de rétrodiffusion de l'eau pure pour a_w et Bb_w).

Une difficulté supplémentaire peut surgir dans les déterminations du spectre des valeurs efficaces $\underline{X}(\lambda)$ lorsque, à certaines longueurs d'onde, les sections efficaces d'absorption ou de rétrodiffusion d'une composante diminuent à un point tel que leur contribution aux facteurs de réflexion en volume est du même ordre de grandeur que les imprécisions des valeurs mesurées. L'algorithme de Levenberg-Marquardt est alors bien incapable de départager la section efficace de ce composant et on aura plutôt recours aux bornes imposées X_{iMIN} ou X_{iMAX}. Pour cette raison, les sections efficaces trouvées pour les autres composantes sont peu fiables pour ces longueurs d'onde. Ces lacunes dans le spectre de $\underline{X}(\lambda)$ peuvent être comblées par interpolation ou extrapolation à partir des sections calculées et exactes du spectre $\underline{X}(\lambda)$.

On voit donc ainsi que le vecteur teneur $\underline{C}$ peut être bel et bien déduit à partir du spectre des facteurs de réflexion en volume mesuré, tout comme peut être déduit le spectre des sections efficaces $\underline{X}(\lambda)$ à partir des facteurs de réflexion en volume et des teneurs.

L'APPLICATION DU MODÈLE DE LA QUALITÉ DE L'EAU À L'ESTIMATION DES TENEURS EN CHLOROPHYLLE, EN MINÉRAL EN SUSPENSION ET EN CARBONE ORGANIQUE EN SOLUTION DANS LE LAC ONTARIO

Au cours de la campagne sur le terrain de 1979, on a prélevé dans la partie occidentale du lac Ontario un ensemble de données indépendantes sur les paramètres de la qualité de l'eau et mesuré des spectres des facteurs de réflexion de l'éclairement énergétique de la surface sous-jacente. À l'aide des spectres optiques mesurés directement, des sections efficaces optiques (pour le modèle à quatre composantes), illustrées aux figures 2 et 3, et de la technique d'optimisation à plusieurs variables de Levenberg-Marquardt analysée dans la section précédente, on a prévu les teneurs en minéraux en suspension, en carbone organique en solution et en chlorophylle *a* (non corrigées pour la présence de phéophytine), puis comparé ces valeurs prévues aux valeurs, trouvées lors d'analyses en laboratoire, des échantillons d'eau prélevés au même moment où on mesurait les spectres optiques.

La figure 33 compare les teneurs prévues en minéral en suspension aux valeurs mesurées directement. Le cône de prévisibilité, défini par les lignes tiretées, représente la prévisibilité avec un facteur de deux par rapport à la ligne de prévision exacte, c'est-à-dire une incertitude sur la prévisibilité de $\pm\log 2$.

Les figures 34 et 35 font voir la même chose mais cette fois-ci respectivement pour la teneur en carbone organique en solution et la teneur en chlorophylle.

On apprend à partir des figures 33 à 35 ce qui suit

(a) Le modèle de la qualité de l'eau à quatre composantes et les sections efficaces optiques des figures 2 et 3 constituent des outils de prévision excellents pour ce qui est des teneurs en minéraux en suspension et un outil de prévision possiblement acceptable pour les teneurs en carbone organique en solution.

(b) Par contre, ce modèle et ses sections efficaces sont pour ainsi dire incapables de prévoir de façon valable les teneurs en chlorophylle *a*.

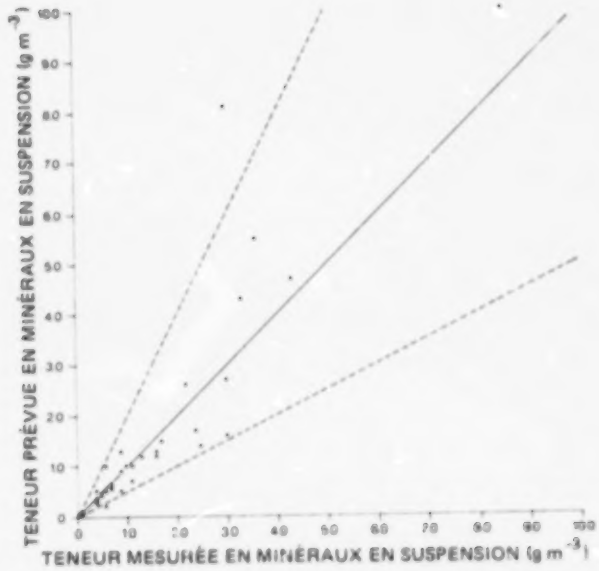

Figure 33. Comparaison entre les teneurs en MS prévues et les teneurs mesurées directement (en faisant usage des sections efficaces des figures 2 et 3).

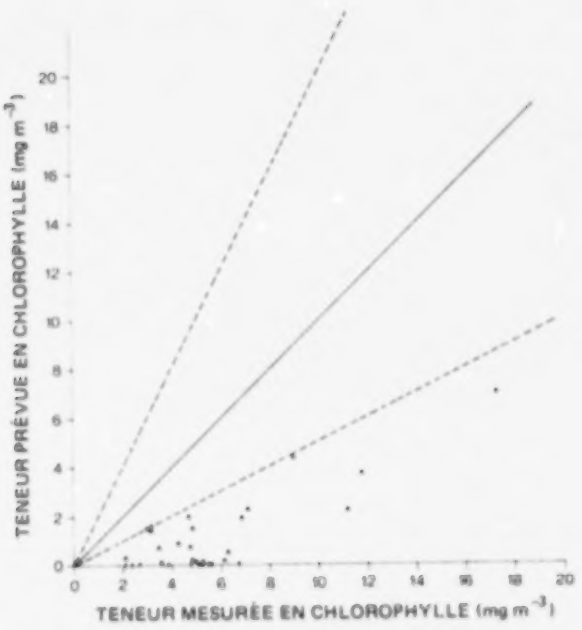

Figure 35. Comparaison entre les teneurs en chlorophylle *a* prévues et des teneurs mesurées directement (en faisant usage des sections efficaces des figures 2 et 3).

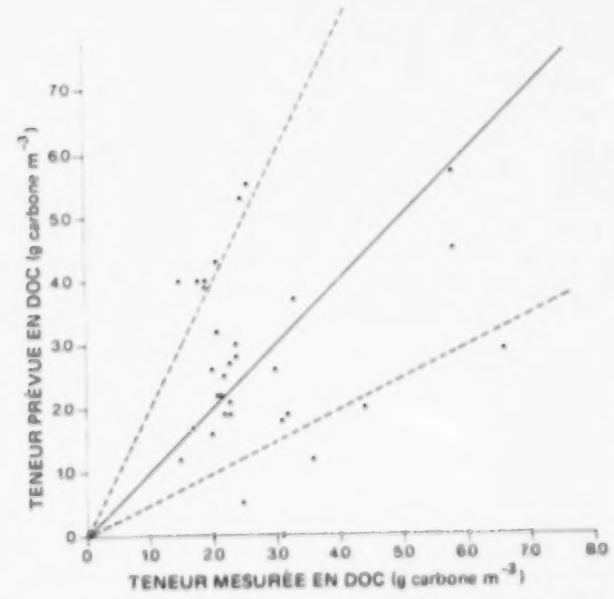

Figure 34. Comparaison entre les teneurs en DOC prévues et celles mesurées directement (en faisant usage des sections efficaces des figures 2 et 3).

On peut voir sans équivoque sur la figure 35 (caractérisée par une sous-prévision étonnante de la teneur en chlorophylle *a*) que les teneurs nulles en chlorophylle *a* non seulement ne correspondent pas à la prévision du processus d'optimisation de Levenberg-Marquardt mais, en plus, n'interfèrent aucunement dans la prévision de valeurs valables des teneurs en minéraux en suspension et en carbone organique en solution. Cette constatation suggère trois possibilités importantes : (i) les spectres des facteurs de réflexion mesurés directement dans le lac Ontario peuvent être simulés de façon satisfaisante (en général) en variant seulement les teneurs en minéraux en suspension et en carbone organique en solution; (ii) (en réalité une variante de (i)), les sections efficaces optiques de la chlorophylle *a* jouent un rôle moins important dans la détermination des propriétés optiques des lacs intérieurs (notamment lorsque les teneurs en chlorophylle sont petites) que les propriétés optiques du minéral en suspension et du carbone organique en solution; et (iii) les sections efficaces optiques de la chlorophylle (tirées des figures 2 et 3 et déterminées pour le lac Ontario à partir du premier ensemble de données) ne conviennent pas au second ensemble de données. En fait, les trois possibilités précitées sont toutes dans un certain sens exactes comme on le démontre ci-après.

La suggestion (i) est concrétisée sur la figure 36 où l'on voit le spectre calculé du «meilleur ajustement» (points reliés) et le spectre expérimental (points non reliés) pour une station type de la partie occidentale du lac Ontario assez près de la berge (dans la péninsule du Niagara).

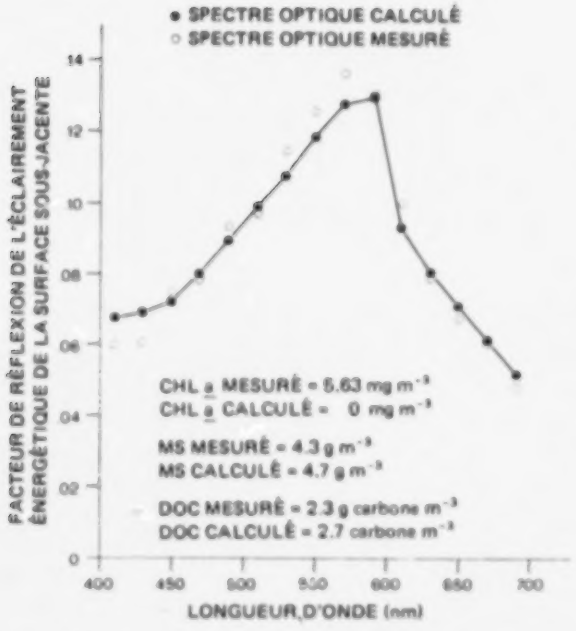

Figure 36. Comparaison entre les spectres des facteurs de réflexion de «meilleur ajustement» calculés et ceux mesurés directement pour une station de la péninsule du Niagara de la partie occidentale du lac Ontario (en faisant usage des sections efficaces des figures 2 et 3).

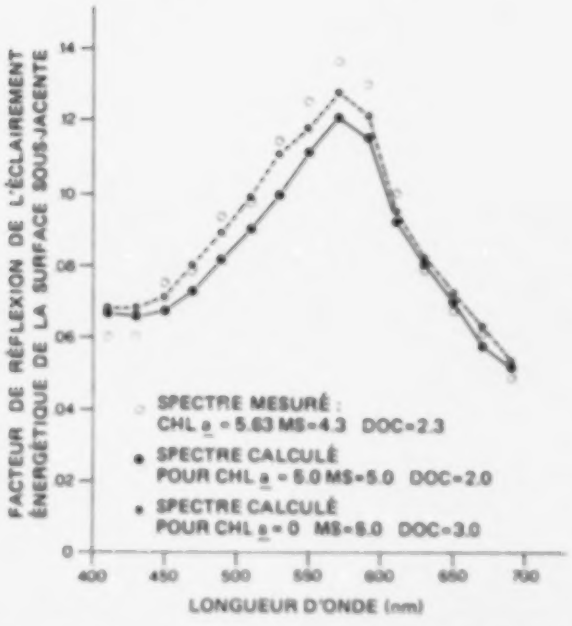

Figure 37. Comparaison entre le spectre de la figure 36 mesuré directement et deux spectres calculés à l'aide des sections efficaces des figures 2 et 3 et deux ensembles de paramètres de la qualité de l'eau.

Les paramètres de la qualité de l'eau prévus (calculés) qui donnent lieu au spectre du «meilleur ajustement» sont énumérés de concert avec les valeurs mesurées de ces paramètres à la station, de sorte que l'on voit immédiatement que les analyses de Levenberg-Marquardt donnent des teneurs raisonnables en minéraux en suspension et en DOC tout en prévoyant une teneur en chlorophylle *a* nulle.

Dans cet exemple particulier, la présence de chlorophylle dans la masse d'eau diminue l'aptitude du modèle de la qualité de l'eau à simuler le spectre des facteurs de réflexion mesuré expérimentalement à la station. C'est ce que nous apprend la figure 37 où deux spectres optiques calculés (ceux des sections efficaces des figures 2 et 3) sont comparés au spectre réel mesuré. La ligne pleine décrit le spectre prévu pour une masse d'eau ayant des teneurs en chlorophylle *a*, en minéraux en suspension et en carbone organique en solution voisines de celles mesurées réellement à la station (on a choisi pour Chl *a* 5.0 mg par mètre cube; pour MS 5.0 g par mètre cube; et pour DOC 2.0 g carbone par mètre cube). Par ailleurs, la ligne tiretée correspond au spectre prévu d'une masse d'eau dont les teneurs en chlorophylle *a*, en minéraux en suspension et en carbone organique en solution sont voisines des teneurs prévues par la technique d'optimisation de Levenberg-Marquardt (on a retenu pour Chl *a* zéro; pour MS 5.0 g par mètre cube; et pour DOC 3.0 g carbone par mètre cube). Une amélioration nette de l'ajustement de la courbe se produit sur le champ dès qu'on enlève la chlorophylle de la masse d'eau.

La forme générale du spectre mesuré directement (c'est-à-dire celle manifestant un pic dans le domaine des longueurs d'onde du vert), que l'on peut voir à la figure 36, est apparue presque toutes les fois que l'on a fait des mesures dans le lac Ontario durant la campagne sur le terrain; et cela aussi bien pour les stations près des berges que pour les stations passablement au large. C'est justement ce que révèle la figure 38 dans laquelle sont illustrés des spectres mesurés directement aussi bien pour des stations près de la berge que pour des stations au milieu du lac, stations visitées durant les mois de mai, juillet et septembre. Il se peut que les grandeurs réelles des facteurs de réflexion de l'éclairement énergétique observées varient (en raison de la variabilité spatio-temporelle des paramètres de la qualité de l'eau en fonction des stations), mais on reconnaît immédiatement dans chaque spectre le pic très marqué correspondant aux longueurs d'onde moyennes. On apprécie sans problème la valeur de la suggestion importante (ii) en examinant les figures 37 et 38 par rapport aux figures 18 et 19.

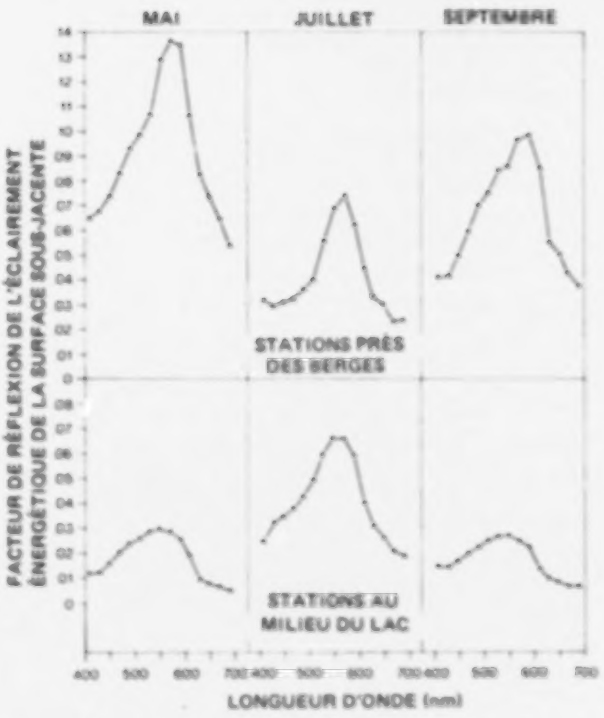

Figure 38. Exemples types des spectres des facteurs de réflexion mesurés directement à des stations près des berges et au milieu du lac Ontario durant toute la campagne sur le terrain.

Comme nous l'apprennent les figures 18 et 19, l'addition soit d'un minéral en suspension ou de chlorophylle *a* à une masse d'eau renfermant environ ~2.0 g carbone par mètre cube donne lieu à un maximum identifiable dans la région des longueurs d'onde moyennes du spectre visible. Au surplus, à l'examen de ces figures il appert que les teneurs relatives en chlorophylle *a* et en minéral en suspension, que l'on trouve normalement dans les lacs intérieurs, font en sorte que le rôle joué par les teneurs en minéral en suspension est plus important que le rôle joué par les teneurs en chlorophylle dans la production du maximum dans le «vert» du spectre mesuré des facteurs de réflexion en volume.

La valeur de la suggestion (iii) est analysée en ayant recours à la méthode d'optimisation de Levenberg-Marquardt afin d'obtenir un nouvel ensemble de sections efficaces optiques pour la chlorophylle *a* (non corrigées pour la présence de phéophytine). Les données optiques et de la qualité de l'eau prélevées aux emplacements d'essai de la partie occidentale du lac Ontario, durant mai et juillet 1979, ont servi à une telle étude. Pour déterminer les nouvelles valeurs de a_{Chl} et b_{Chl} dans tout le domaine du spectre visible, on a retenu les sections efficaces des minéraux en suspension et du carbone organique en solution des figures 2 et 3 et on a utilisé la technique d'optimisation. Toutefois, pour le deuxième ensemble de données, il existait déjà des informations supplémentaires sur la composition du rayonnement incident au-dessus de la surface, et on a décidé d'en faire usage. Parce que les coefficients $r_n(0)$ de l'équation 7 sont fonction de la répartition du rayonnement incident (Gordon et coll., 1975) (conséquence directe du fait que le facteur de réflexion en volume est l'une des propriétés apparentes de la masse d'eau) le facteur de réflexion mesuré est influencé à la fois par l'angle zénithal du soleil (heure du jour) et la fraction diffuse de l'éclairement énergétique ascendant. Ceci reste vrai quels que soient les changements de la teneur en substances en suspension et en solution de la masse d'eau (reportez-vous aussi à l'analyse de Jerome et coll., 1982).

La figure 39 (adaptation du tableau B.3.2 de Moniteq Ltd. [1981]) fait voir la fraction de l'éclairement descendant au-dessus de l'eau, qui est diffusée pour chaque mois durant la période de prélèvement de l'ensemble des données indépendantes. Cette dernière figure sert ensuite à construire un ensemble approprié de coefficients $r_n(0)$ correspondant à chaque fraction, que l'on introduit dans l'équation 7 avant de lancer l'analyse inverse de Levenberg-Marquardt.

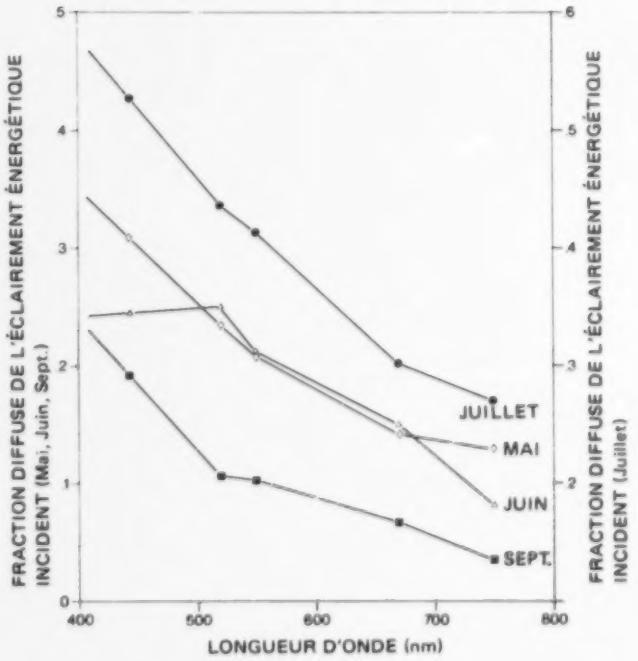

Figure 39. Variation de la fraction diffuse de l'éclairement énergétique descendant au-dessus de l'eau en fonction de la longueur d'onde durant toute la campagne sur le terrain.

Les résultats de l'analyse de Levenberg-Marquardt donnent des valeurs b_{Chl} qui sont révélées essentiellement conformes aux valeurs b_{Chl} obtenues antérieurement. Par contre, les valeurs a_{Chl} s'écartent sensiblement des valeurs a_{Chl} obtenues antérieurement comme nous le fait voir la figure 40. Ces deux ensembles de données sont très voisins dans le domaine des hautes longueurs d'onde du spectre (rouge), tandis que les valeurs a_{Chl} tirées du deuxième ensemble des données (c'est-à-dire de la méthode d'optimisation) pour $\lambda < \sim 600$ nm sont presque toutes deux fois plus faibles que les valeurs a_{Chl} obtenues d'après le premier ensemble des données (méthode de la régression multiple).

À nouveau, à partir des valeurs optimisées de Levenberg-Marquardt pour a_{Chl} (pour b_{Chl} et pour toutes les autres sections efficaces des figures 2 et 3) et des spectres mesurés directement, et en ayant recours à la technique d'optimisation (tout en tenant compte du fait que les $r_n(0)$ sont fonction de la répartition du rayonnement incident), on a estimé les indicateurs de la qualité de l'eau qui produisent les simulations «les mieux ajustées» aux spectres des facteurs de réflexion en volume observés.

La figure 41 (que l'on peut comparer directement à la figure 36) permet de rapprocher le spectre mesuré directement (points non reliés) et le spectre calculé du «meilleur ajustement» (points reliés) qui découle de l'utilisation des valeurs modifiées de a_{Chl}. Il appert que la technique d'optimisation, utilisée concurremment avec des valeurs acceptables de prévision pour les teneurs en minéraux en suspension et en carbone organique en solution de la station, prévoit une valeur acceptable de la teneur en chlorophylle.

Les figures 42, 43 et 44 nous donnent une illustration de l'écart entre les concentrations prévues et les concentrations mesurées, respectivement, des minéraux en suspension, du carbone organique en solution et de la chlorophylle *a*. Ces figures peuvent être rapprochées des figures 33 à 35, la seule différence entre ces deux ensembles de résultats étant que les figures 42 à 44 ont été construites en tenant compte du fait que les $r_n(0)$ sont fonction de la répartition de la luminance énergétique incidente et en utilisant la courbe pointillée (figure 40) qui figure la dépendance spectrale de a_{Chl}.

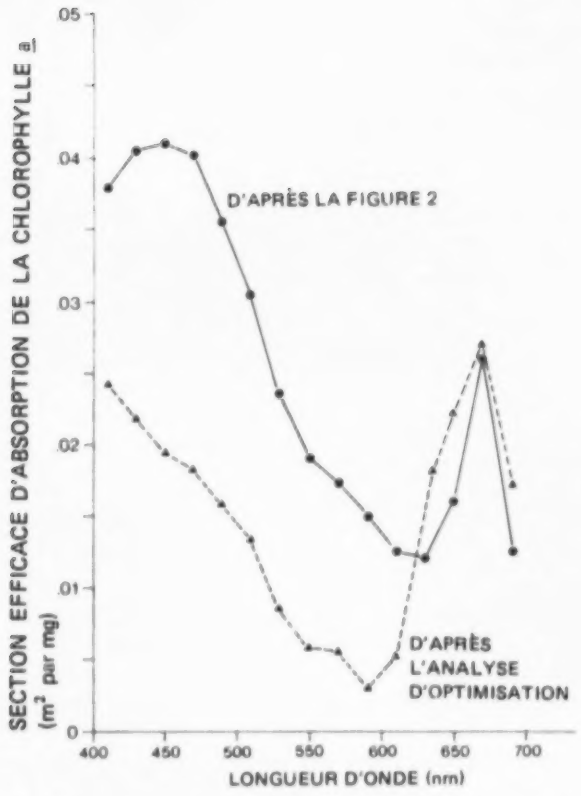

Figure 40. **Comparaison des sections efficaces d'absorption de la chlorophylle *a* pour deux ensembles de données sur la qualité de l'eau et de données optiques.**

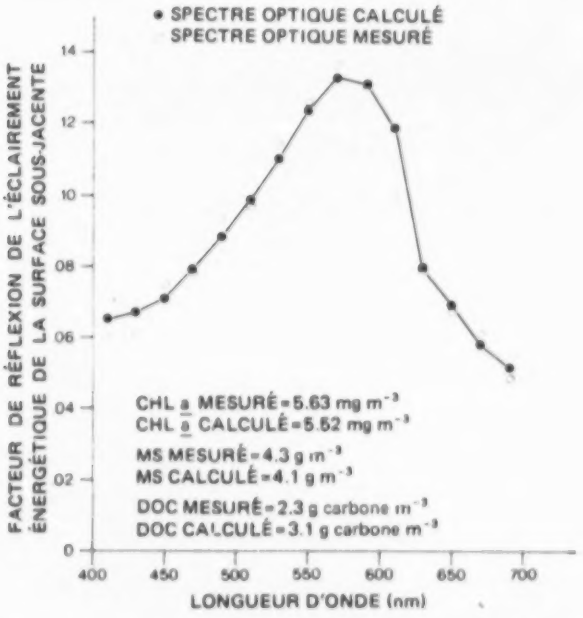

Figure 41. **Comparaison entre les spectres des facteurs de réflexion de «meilleur ajustement» calculés et ceux mesurés directement pour la station de la péninsule du Niagara, celle de la figure 36 (en faisant usage des sections efficaces d'absorption modifiées de la chlorophylle *a*).**

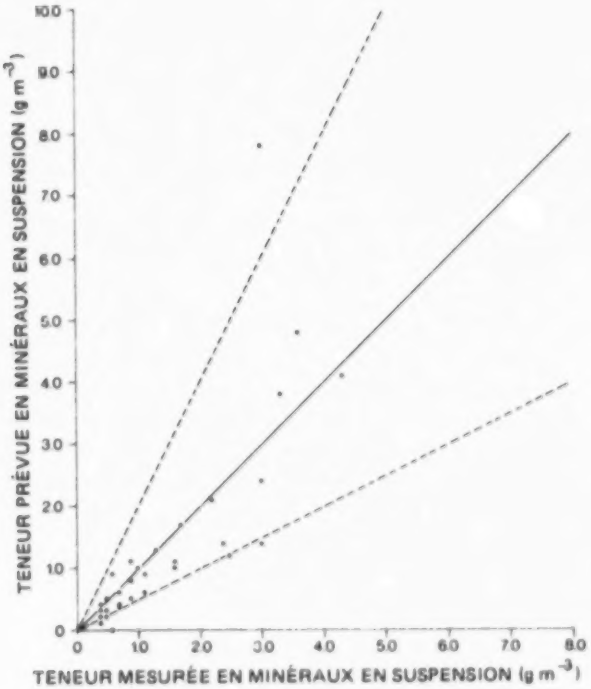

Figure 42. Comparaison entre les teneurs en MS prévues et les teneurs mesurées directement (en faisant usage des sections efficaces d'absorption modifiées de la chlorophylle *a*, celles de la figure 40).

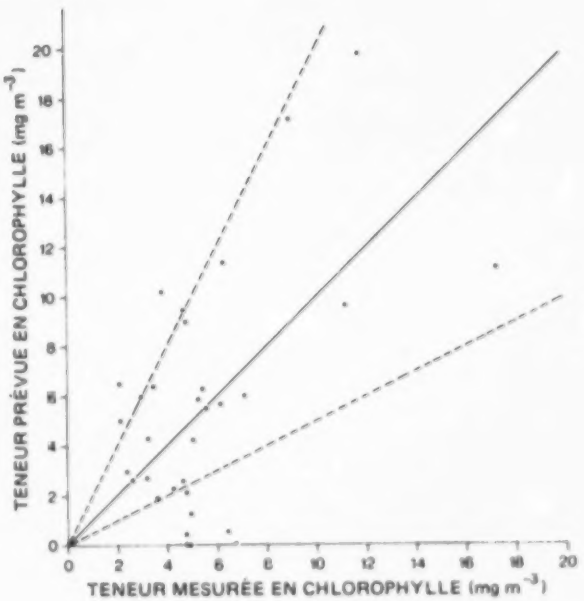

Figure 44. Comparaison entre les teneurs en chlorophylle *a* prévues et celles mesurées directement (en faisant usage des sections efficaces d'absorption modifiées de la chlorophylle *a*, celles de la figure 40).

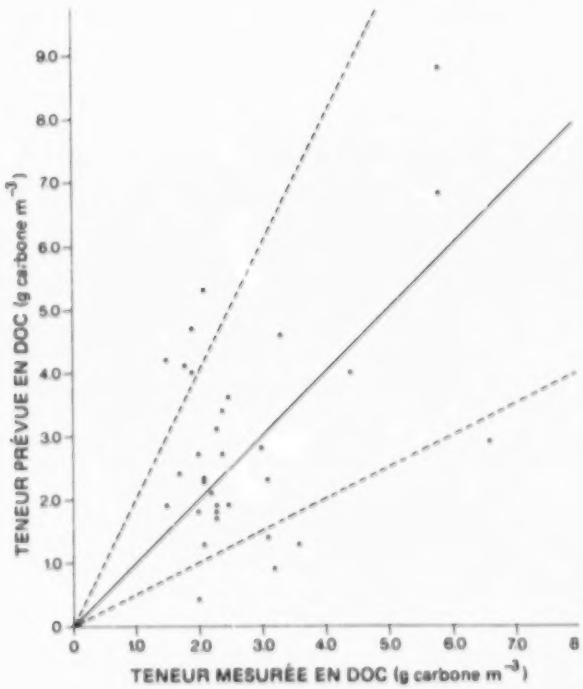

Figure 43. Comparaison entre les teneurs en DOC prévues et les teneurs mesurées directement (en faisant usage des sections efficaces d'absorption modifiées de la chlorophylle *a*, celles de la figure 40).

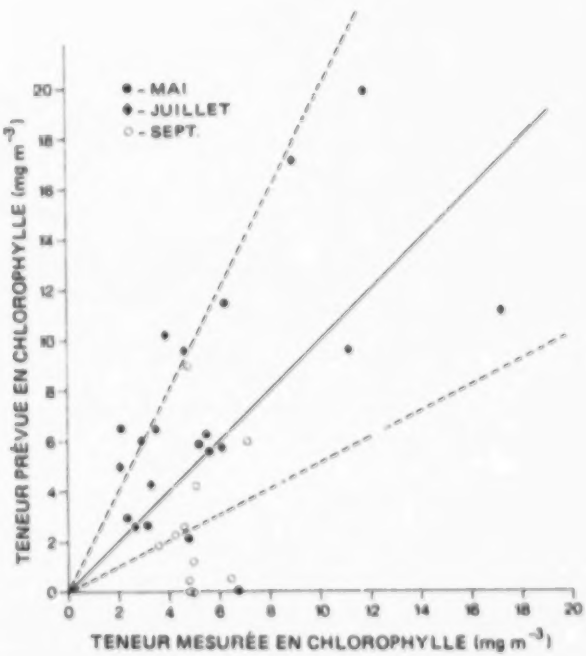

Figure 45. Comparaison entre les teneurs mensuelles prévues de la chlorophylle *a* et les teneurs mesurées directement (en faisant usage des sections efficaces d'absorption modifiées de la chlorophylle *a*, celles de la figure 40).

L'étude des figures 42 à 44 nous permet de constater ce qui suit :

(a) Que les qualités de prévision du modèle optique à quatre composantes pour les teneurs en minéraux en suspension et en carbone organique en solution, bien que changées dans une certaine mesure par l'utilisation de sections efficaces d'absorption de la chlorophylle *a* modifiées, ne semblent pas être touchées de façon significative (dans le sens statistique du terme).

(b) Que l'utilisation de ces sections efficaces modifiées semble améliorer d'une façon très nette le pouvoir de prévision du modèle pour ce qui est des teneurs en chlorophylle *a*. La majeure partie des teneurs en chlorophylle *a* prévues de façon erronée (figure 44) ont été observées durant le mois de septembre. C'est ce qui apparaît plus clairement à la figure 45 qui ventile l'information de la figure 44 suivant les mois de mai, juillet et septembre au cours desquels on a fait des mesures des facteurs en réflexion en volume.

DIFFICULTÉS PROPRES AUX PRÉVISIONS DE LA CHLOROPHYLLE

Les principes physiques sur lesquels sont fondés les modèles optiques à plusieurs composantes sont valables dans les limites des contraintes imposées et des connaissances actuelles du milieu aquatique. Les propriétés d'absorption et de diffusion des substances en suspension et en solution des masses d'eau intérieures régissent, en même temps que les propriétés de l'éclairement énergétique incidentes au-dessus de la surface, les spectres des facteurs de réflexion de l'éclairement énergétique de la surface sous-jacente que l'on mesure expérimentalement. Les indicateurs de la qualité de l'eau (substances organiques et inorganiques des masses d'eau naturelles) font office, partout dans la colonne d'eau, de centres d'absorption et de diffusion. De cela, il découle logiquement que, dans les limites des ambiguïtés éventuelles, les spectres simulés, dus à des teneurs connues des indicateurs de la qualité de l'eau, peuvent être comparés mathématiquement aux spectres mesurés dans le but d'estimer les teneurs *in situ* qui donnent lieu aux spectres observés.

Cependant l'aspect essentiel d'une telle méthode de prévision est la connaissance précise des sections efficaces optiques (absorption et diffusion par unité de teneur) des substances constitutives de la masse d'eau considérée. Bien que l'on note un accroissement à l'échelle mondiale des travaux de recherche sur ce genre d'information, les résultats existants ne sont pas applicables, pour le moment, à toutes les situations. On voit bien qu'il existe un accord général sur la gamme observée de ces sections efficaces et sur le fait que ces sections ne sont pas seulement fonction de la géographie des sous-substances, mais également du temps. Un des principaux obstacles à une recherche optique de ce genre réside donc dans l'inaptitude inhérente à produire expérimentalement des valeurs équivalentes ou des valeurs extrapolées exactes pour les paramètres critiques. Nos propres travaux effectués sur le lac Ontario mettent bien en évidence cette inaptitude. Deux ensembles indépendants de données sur la qualité de l'eau et sur les valeurs optiques correspondantes ont été prélevées dans la partie occidentale du lac Ontario durant la campagne sur le terrain de 1979. Même s'il est vrai que des spectres de longueurs d'onde analogues pour les sections efficaces d'absorption et de diffusion du minéral en suspension et du carbone organique en solution et les spectres pour les sections efficaces de diffusion de la chlorophylle semblent convenir assez bien aux deux ensembles de données, les spectres des sections efficaces d'absorption de la chlorophylle de ces deux ensembles sont passablement dissemblables (voir figure 40). Compte tenu de ces contraintes sur les sections efficaces, le modèle optique à quatre composantes permet d'obtenir une prévision de l'indicateur de la qualité de l'eau précise à un facteur de deux. Une prévision de la qualité de l'eau de cette valeur est, comme on s'en doute bien, un point litigieux que nous ne traiterons pas plus avant.

L'imprécision observée (c'est-à-dire l'imprécison concernant la bonne valeur pour des substances particulières à un certain endroit ou à un certain moment à l'intérieur du cycle de croissance biologique) a été remarquée par plusieurs chercheurs. Tout dernièrement, Morel et Bricaud (1981) ont fait une analyse élégante de ces problèmes imputables à la variabilité des sections efficaces d'absorption de la chlorophylle *a* et fait la preuve que des écarts importants par rapport à une valeur constante existent non seulement pour différentes espèces particulières de cellules chlorophylliennes, mais également pour des cellules variables (en taille, en structure, en stabilité, etc.) d'une même espèce.

On peut voir à la figure 46 une représentation type des très grands écarts qui peuvent exister entre diverses déterminations de a_{Chl}; on a reporté sur cette figure non seulement les résultats apparemment contradictoires du présent travail, mais également les résultats d'autres chercheurs. Plusieurs caractéristiques apparaissent immédiatement à partir du nombre limité de données de la figure 46 :

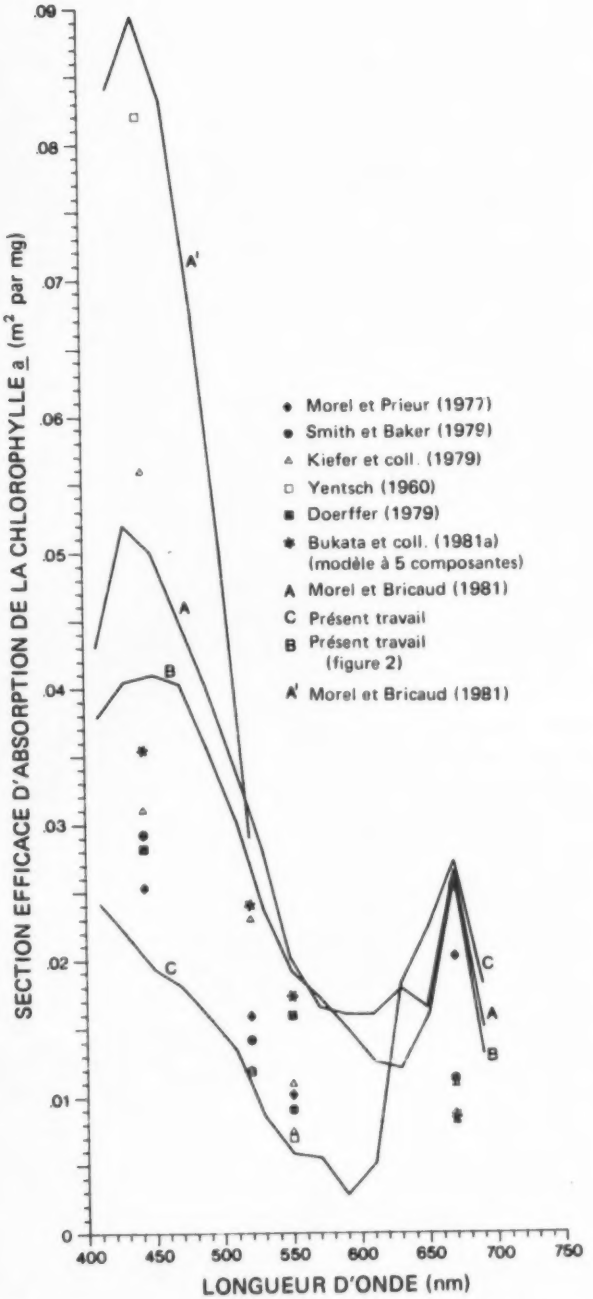

Figure 46. Intercomparaison d'un certain nombre de tentatives indépendantes de détermination des sections efficaces d'absorption de la chlorophylle *a*.

(a) Il y a en général un bon accord pour ce qui a trait à la crête d'absorption dans la région du rouge du spectre visible (même si dans nos travaux antérieurs [Bukata et coll., 1981a] de même que dans les travaux d'autres chercheurs concernant les bandes du satellite NIMBUS-G, on n'a pas pu mettre en évidence une crête significative pour ces longueurs d'onde).

(b) Des écarts très importants par rapport à une constante ont été observés dans l'extrémité bleue du spectre tout comme l'existence d'une crête d'absorption possible près de 450 nm. Remarquez que la courbe d'absorption résultant du premier ensemble de données du lac Ontario (courbe B) affiche une crête d'absorption distincte dans le bleu, alors que la même courbe provenant du deuxième ensemble (courbe C) en est dépourvue.

(c) Les diverses courbes de la figure 46 possèdent des pentes montantes et descendantes variables. Ainsi qu'on l'a déjà analysé, des courbes variables de cette nature peuvent modifier dans des proportions draconiennes la forme des profils de l'éclairement énergétique de la surface sous-jacente mesurée expérimentalement.

(d) La courbe C de la figure semble être une enveloppe qui borne inférieurement les données reportées sur le graphique. Cette observation n'est pas en fait une conclusion valable puisque plusieurs autres chercheurs (dont les données ne sont pas illustrées) ont obtenu des valeurs de a_{Chl} plus petites que les données de la courbe C, alors que d'autres ont observé des valeurs de a_{Chl} supérieures à celles de la courbe A'.

Les problèmes posés par la prévision de la chlorophylle *a* à partir des mesures optiques et de certaines méthodologies émergent immédiatement de l'examen de la figure 46. Malgré ces problèmes, les résultats de la présente enquête semblent assez encourageants. Le lac Ontario manifeste un haut degré de complexité optique, et bien qu'il soit représentatif des eaux complexes du point de vue optique, il n'est pas nécessairement représentatif de la plus grande partie des masses d'eau intérieures. Un modèle optique à quatre composantes (même entaché d'imprécision pour ce qui a trait aux propriétés d'absorption et de diffusion unitaires des composantes chlorophylliennes) s'est avéré utile comme outil de prévision, avec un facteur inférieur à deux, des teneurs simultanées de la chlorophylle, de minéraux en suspension et d'un carbone organique en solution pour le lac Ontario. On ne pêche certainement pas par excès d'optimisme en concluant que la précision de la prévision devrait être nettement plus marquée dans le cas d'eaux beaucoup moins complexes du point de vue optique.

RÉFÉRENCES

Bukata, R.P., J.H. Jerome, J.E. Bruton, et S.C. Jain. 1979. Determination of inherent optical properties of Lake Ontario coastal waters. Appl. Opt. 18: 3926-3932.

Bukata, R.P., J.H. Jerome, J.E. Bruton, S.C. Jain, et H.H. Zwick. 1981a. Optical water quality model of Lake Ontario. 1. Determination of the optical cross sections of organic and inorganic particulates in Lake Ontario. Appl. Opt. 20: 1696-1703.

Bukata, R.P., J.E. Bruton, J.H. Jerome, S.C. Jain, et H.H. Zwick. 1981b. Optical water quality model of Lake Ontario. 2. Determination of chlorophyll *a* and suspended mineral concentrations of natural waters from submersible and low altitude optical sensors. Appl. Opt. 20: 1704-1714.

Bukata, R.P., J.H. Jerome, et J.E. Bruton. 1981c. Validation of a five-component optical model for estimating chlorophyll *a* and suspended mineral concentrations in Lake Ontario. Appl. Opt. 20: 3472-3474.

Burns, N.M. 1980. Centre canadien des eaux intérieures (communication privée).

Di Toro, D.M. 1978. Optics of turbid estuarine waters: approximations and applications. Water Res. 12:1059-1068.

Doerffer, V.R. 1979. The distribution of substances in the Elfe-Estuary determined by remote sensing. Arch. Hydrobiol. 43: 119-224.

Gordon, H.R., O.B. Brown et M.M. Jacobs. 1975. Computed relationships between the inherent and apparent optical properties of a flat homogeneous ocean. Appl. Opt. 14: 417-427.

Hulburt, E.O. 1945. Optics of distilled and natural water. J. Opt. Soc. Am. 35: 698-705.

IMSL 1980. The IMSL Library Reference Manual. Édition 8 (révisée en juin 1980), International Mathematic and Statistical Libraries, Inc., Houston.

Jain, S.C., H.H. Zwick, W.D. McColl, R.P. Bukata et J.H. Jerome. 1980. Combined Coastal Zone Color Scanner (CZCS), aircraft, and *in situ* water quality remote sensing experiment in Lake Ontario. Proc. Soc. Photo-Op Instrum. Eng. 208: 178-188.

Jerome, J.H., J.E. Bruton et R.P. Bukata. 1982. Influence of scattering phenomena on the solar zenith angle dependence of in-water irradiance levels. Appl. Opt. 21: 642-647.

Kiefer, D.A., R.J. Olson et W.H. Wilson. 1979. Reflectance spectroscopy of marine phytoplankton. Part 1. Optical properties as related to age and growth rate. Limnol. Oceanogr. 24: 664-672.

Levenberg, K. 1944. A method for the solution of certain non-linear problems in least squares. Quant. Appl. Math. 2: 164-168.

Marquardt, D.W. 1963. An algorithm for least-squares estimation of nonlinear parameters. J. SIAM, 11(2).

Moniteq Ltd. 1981. Water quality remote sensing report. Appendices. Numéro de contrat ASC 19SQ 23413-8-1345, Table B.3.2., p. 22.

Morel, A. et A. Bricaud. 1981. Theoretical results concerning light absorption in a discrete medium, and application to specific absorption of phytoplankton. Deep-Sea Res. 11: 1375-1393.

Morel, A. et L. Prieur. 1977. Analysis of variations in ocean color. Limnol. Oceanogr. 22: 709-722.

Smith, R.C. et K.S. Baker. 1979. Optical classification of natural waters. Limnol. Oceanogr. 23: 260-267.

Yentsch, C.S. 1960. The influence of phytoplankton pigments on the color of sea water. Deep-Sea Res. 7: 1-9.

Zwick, H.H., S.C. Jain et R.P. Bukata. 1980. A satellite airborne and *in situ* water quality experiment in Lake Ontario. Compte rendu de l'atelier ISPRA sur l'expérience EURASEP du scanner couleur des océans, p. 181-198.

ANNEXE

GLOSSAIRE

Quantité d'énergie rayonnante, Q – La quantité d'énergie transmise par rayonnement.

Q en joules (J)

Flux énergétique, Φ – La puissance de l'énergie de rayonnement.

$$\Phi = \frac{Q}{t} \quad \text{en watts (W)}$$

Intensité énergétique, I – Le flux énergétique émis par une source ponctuelle par unité d'angle solide $\partial\omega$.

$$I = \frac{\partial\Phi}{\partial\omega} \quad \text{en W sr}^{-1}$$

Luminance énergétique, L – Le flux énergétique par unité d'angle solide $\partial\omega$ par unité d'air de la projection $\partial A \cos\Theta$ est l'unité d'aire de la surface et Θ l'angle entre le flux énergétique et la normale à cet élément de la surface.

$$L = \frac{\partial^2\Phi}{\partial A \cos\Theta\ \partial\omega} \quad \text{en W m}^{-2}\ \text{sr}^{-1}$$

Éclairement énergétique, E – Le flux énergétique par ∂A.

$$E = \frac{\partial\Phi}{\partial A} \quad \text{en W m}^{-2}$$

Éclairement énergétique descendant,

$$E_d = \int_{\Phi=0}^{2\pi} \int_{\Theta=0}^{\pi/2} L(\Theta,\Phi) \cos\Theta\ \partial\omega$$

Éclairement énergétique ascendant,

$$E_u = \int_{\Phi=0}^{2\pi} \int_{\Theta=\pi/2}^{\pi} L(\Theta,\Phi) \cos\Theta\ \partial\omega$$

où $\Theta = 0$ indique la direction normale vers le bas.

Coefficient de diffusion, a – La fraction de l'énergie de rayonnement d'un faisceau collimaté absorbé par unité de distance ∂x.

$$a = \frac{-(\partial\Phi)\text{abs}}{\Phi\partial x} \quad \text{en m}^{-1}$$

Coefficient de diffusion, b – Fraction de l'énergie de rayonnement d'un faisceau collimaté diffusé par unité de distance ∂x.

$$b = \frac{-(\partial\Phi)\text{scat}}{\Phi\partial x} \quad \text{en m}^{-1}$$

Coefficient d'affaiblissement total, c – Fraction de l'énergie de rayonnement retirée d'un faisceau par unité de distance ∂x due à la fois à l'absorption et à la diffusion.

$$c = -\left[\frac{(\partial\Phi)_{abs} + (\partial\Phi)_{scat}}{\Phi\partial x}\right]$$

$$= a+b \qquad \text{en m}^{-1}$$

Albédo de diffusion, ω_o – Le nombre d'interaction de diffusion exprimé sous forme d'une fraction du nombre total d'interactions.

$$\omega_o = \frac{b}{c}$$

Fonction de diffusion en volume, $\beta(\Theta)$ – L'intensité énergétique diffusée dans la direction Θ par unité de volume de diffusion ∂V normalisée pour l'éclairement énergétique incident E. Les intégrations appropriées de $\beta(\Theta)$ donnent des définitions mathématiques des coefficients de diffusion, de rétrodiffusion et de prodiffusion.

$$\beta(\Theta) = \frac{\partial I(\Theta)}{E\partial V} \quad \text{en m}^{-1}\ \text{sr}^{-1}$$

Probabilité de prodiffusion, F – Le rapport de la diffusion dans l'hémisphère avant (c'est-à-dire l'hémisphère devant l'interaction) à la diffusion totale dans toutes les directions.

$$F = \frac{\int_{\Phi=0}^{2\pi} \int_{\Theta=0}^{\pi/2} \beta(\Theta)\partial\omega}{\int_{\Phi=0}^{2\pi} \int_{\Theta=0}^{\pi} \beta(\Theta)\partial\omega}$$

Probabilité de rétrodiffusion, B – Le rapport de la diffusion dans l'hémisphère arrière (c'est-à-dire l'hémisphère derrière l'interaction) à la diffusion totale dans toutes les directions.

$$B = \frac{\int_{\Phi=0}^{2\pi} \int_{\Theta=\pi/2}^{\pi} \beta(\Theta)\partial\omega}{\int_{\Phi=0}^{2\pi} \int_{\Theta=0}^{\pi} \beta(\Theta)\partial\omega}$$

Coefficient de prodiffusion,

$$Fb = \int_{\Phi=0}^{2\pi} \int_{\Theta=0}^{\pi/2} \beta(\Theta)\partial\omega \quad \text{en } m^{-1}$$

Coefficient de rétrodiffusion,

$$Bb = \int_{\Phi=0}^{2\pi} \int_{\Theta=\pi/2}^{\pi} \beta(\Theta)\partial\omega \quad \text{en } m^{-1}$$

Coefficient de diffusion,

$$b = \int_{\Phi=0}^{2\pi} \int_{\Theta=0}^{\pi} \beta(\Theta)\partial\omega \quad \text{en } m^{-1}$$

où $b = Fb + Bb$.

Facteur de réflexion en volume (rapport de l'éclairement énergétique ou facteur de réflexion de l'éclairement énergétique ou facteur de réflexion diffuse), R — Le rapport de l'éclairement énergétique ascendant à l'éclairement descendant en un point quelconque.

$$R = \frac{E_u}{E_d}$$

Coefficient d'affaiblissement de l'éclairement énergétique, K — La dérivée du logarithme de la profondeur de l'éclairement énergétique descendant à la profondeur z.

$$K(z) = \frac{1}{E_d(z)} \left[\frac{\partial E_d(z)}{\partial z} \right] \text{ en } m^{-1}$$

Éclairement énergétique scalaire, E_0 — L'intégrale dans toutes les directions de la répartition de la luminance énergétique en un point.

$$E_0 = \int_{\Phi=0}^{2\pi} \int_{\Theta=0}^{\pi} L(\Theta,\Phi)\partial\omega \quad \text{en W } m^{-2}$$

Éclairement énergétique scalaire descendant, E_{0d}

$$E_{0d} = \int_{\Phi=0}^{2\pi} \int_{\Theta=0}^{\pi/2} L(\Theta,\Phi)\partial\omega \quad \text{en W } m^{-2}$$

Fonction de répartition descendante, D_d — Le rapport de l'éclairement énergétique scalaire descendant à la profondeur z à l'éclairement énergétique descendant à cette même profondeur.

$$D_d(z) = \frac{E_{0d}(z)}{E_d(z)}$$